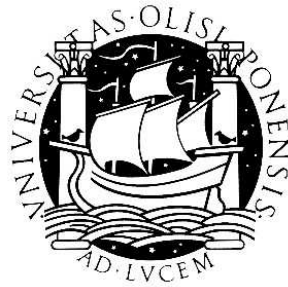


UNIVERSIDADE DE LISBOA
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**ESTUDO PARA UM SISTEMA DE CVD PARA OBTENÇÃO DE PLACAS AUTO
SUSTENTÁVEIS DE SILÍCIO PARA APLICAÇÕES FOTOVOLTAICAS**

David Miguel Rodrigues Pera

MESTRADO EM ENGENHARIA FÍSICA

2008

UNIVERSIDADE DE LISBOA
FACULDADE DE CIÊNCIAS
DEPARTAMENTO DE FÍSICA



**ESTUDO PARA UM SISTEMA DE CVD PARA OBTENÇÃO DE PLACAS AUTO SUSTENTÁVEIS DE
SILÍCIO PARA APLICAÇÕES FOTOVOLTAICAS**

David Miguel Rodrigues Pera

MESTRADO EM ENGENHARIA FÍSICA

2008

Dissertação orientada pelo Prof. Doutor João Manuel de Almeida Serra

Prefácio

A elaboração desta dissertação surge no âmbito da avaliação da cadeira incluída no último ano curricular do Mestrado em Engenharia Física , “Dissertação de mestrado”. Os estudos aqui descritos foram desenvolvidos no Laboratório de Aplicações Fotovoltaicas e Semicondutores (LAFS), pertencente ao Departamento de Engenharia Geográfica, Geofísica e Energia (DEGGE) da Faculdade de Ciências da Universidade de Lisboa, ao abrigo de uma bolsa de Investigação Científica prevista pelo projecto “*SDS Ribbons*”, financiado pela Fundação Faculdade de Ciências (FCT: PTDC/ENR/67616/2006).

A contribuição dos estudos efectuados neste mestrado para o projecto “SDS Ribbons”, consistiram fundamentalmente na execução das seguintes actividades:

- Compreender a origem da heterogeneidade da deposição de silício no reactor *SDS* de 1ª geração através de uma caracterização mais profunda.
- Utilizar esse estudo no projecto do forno *SDS* de 2ª geração.

Resumo

O desenvolvimento do mercado das energias renováveis levou a um aumento significativo da procura de tecnologia fotovoltaica. A investigação na área de fornecimento de substratos de silício cristalino para produção de células fotovoltaicas, está direccionada para a procura de soluções que substituam o recurso que domina actualmente o mercado, as *wafers* obtidas por corte de lingotes que representam cerca de um terço do preço final de uma célula fotovoltaica. Nesta perspectiva, foi desenvolvido no Laboratório de Aplicações Fotovoltaicas e Semicondutores da Universidade de Lisboa um processo de crescimento de silício multicristalino directamente na forma de uma fita, o processo *SDS Ribbons*. Este processo baseia-se na deposição de silício por CVD, a baixas temperatura e a pressão ambiente, a partir de silano, sobre um substrato de pó de silício de elevada pureza. Após a deposição, o filme de silício nanoporoso é recristalizado através da técnica de zona fundida flutuante (ZMR), que garante a elevada qualidade cristalina e pureza das fitas de silício multicristalino.

Apesar da elevada qualidade das células fotovoltaicas produzidas a partir das fitas de silício do reactor *SDS* de 1ª geração, verificou-se uma reduzida taxa de sucessos na fase de recristalização, devido ao colapso da zona fundida. Pensa-se que na base destes resultados esteja a heterogeneidade da porosidade e a espessura do filme depositado. Por esta razão deu-se início ao projecto de um reactor *SDS* de 2ª geração, que visa não só resolver os problemas do primeiro, como também implementar novas ideias que tornarão o processo mais eficiente do ponto de vista da rentabilização do silano e permitirão a sua integração num processo em cadeia.

Os estudos apresentados neste documento consistem em duas partes distintas:

A primeira é direccionada ao reactor *SDS* de 1ª geração, em que se explora a distribuição da radiação na amostra e o comportamento dinâmico do gás no interior do reactor, e nomeadamente da convecção natural, de modo a correlacioná-los com os perfis de deposição dos filmes depositados por CVD. Para este estudos foram explorados dois *softwares* comerciais de análise numérica, o *FloWorks* no âmbito de dinâmica de fluidos e modos de trocas de calor, e o *ZEMAX* para simulações de *ray-tracing*.

A segunda é dedicada ao desenvolvimento do reactor de 2ª geração. Com recurso ao software *Floworks*, exploram-se factores do foro geométrico e termofísico que proporcionam a formação de células de convecção dentro da cavidade do reactor CVD, de modo a permitir a circulação controlada do gás junto às zonas de deposição, com o objectivo de a rentabilizar. Este estudo culminou numa proposta para um novo reactor de CVD. Efectuou-se também um estudo analítico para um sistema óptico concentrador para este reactor CVD.

Palavras chave: CVD, silício, simulação numérica

Abstract

The development of the renewable energies market lead to a significant increase in the demand of photovoltaic technology. The research in the area of crystalline silicon feedstock for photovoltaic cells production, is focused on the research of solutions to replace the dominant path in nowadays market - the *wafers* obtained by the cut of ingots – which represents about a third of the final price of a photovoltaic cell. In this framework, the Laboratório de Aplicações Fotovoltaicas e Semicondutores da Universidade de Lisboa, is developing a new process for the growth of multicrystalline silicon ribbons, the *SDS Ribbons* process. This process is based on the silicon deposition by CVD at low temperatures and atmospheric pressure, from silane, on top of a high purity silicon powder substrate. After the deposition, the nano-porous silicon film is recrystallized by the zone melting recrystallization (ZMR) technique, which guarantees the high crystalline quality and purity of the multicrystalline silicon ribbons.

Despite the high quality of solar cells produced from the first generation SDS reactor, a reduced rate of successes in the recrystallization step was obtained, due to the collapse of the molten zone during the ZMR step. This problem seems to be related to the porosity and thickness heterogeneity of the deposited film. For this reason a new design for a second generation SDS reactor was started, with the purpose to solve the first reactor problems and to implement new ideas which will make the process more efficient from the point of view of silane conversion and to allow its integration into a continuous mode process.

The studies presented in this document are divide in two distinct parts:

The first one is related to the first generation reactor, where both the radiation distribution in the sample and the dynamic behavior of the gas in the interior of the reactor are analysed, in order to correlate them with the deposition profiles of the deposited films by CVD. For these studies two numerical analysis commercial softwares where explored; the *FloWorks* module for fluids dynamic and heat exchange modes, and the ZEMAX ray tracing simulation.

The second one is dedicated to the development of the second generation reactor. Using the software *FloWorks*, geometric and thermophysics factors were explored to analyze the convection cells formation inside the CVD reactor cavity, to allow a controlled circulation of the gas nearby the deposition zones, with the purpose of enhancing the deposition rate. This study culminated in a proposal for a new CVD reactor. An analytical study for a concentrator optical system for this new reactor is also presented.

Keywords : CVD, silicon, numerical simulation

Agradecimentos

Ao Professor João Serra pelo seu empenho na orientação deste Mestrado, pela sua constante transmissão de conhecimentos, práticas e entusiasmo no âmbito da investigação científica. Pelas constantes sugestões sem as quais esta dissertação não seria certamente possível.

À Eng. Cláudia Rodrigues Pinto, pelo fundamental apoio prestado e partilha de conhecimentos no âmbito do tema desta dissertação.

Ao Doutor Miguel Brito, pela sua constante disponibilidade no apoio em questões científicas e no encorajamento diário.

Ao colega e técnico de laboratório Ivo Costa, pelo apoio dado diariamente relacionado com as questões mais práticas.

À Professora Margarida Godinho, coordenadora de Mestrado, pela prontidão no esclarecimento de dúvidas e apoio na resolução de questões burocráticas envolvidas neste Mestrado.

A todos os integrantes do LAFS ainda não referidos, José Silva, Catarina Vivaldo, Doutor Kilian Lobato, Isabel Ferreira e Filipe Martins pela partilha de conhecimentos e companheirismo de todos os dias, bem como aos meus colegas e vizinhos de laboratório, Bruno Ribeiro, André Saraiva, Doutor Rui Borges e Pedros.

Pelo fundamental apoio para a concretização deste Mestrado à Inês Silva e à minha família.

Índice

1	Introdução	10
1.1	Processo <i>SDS</i>	13
2	Recurso à simulação – <i>SolidWorks/FlowWorks</i> , <i>ZEMAX</i> ..	16
2.1	FloWorks	16
2.1.1	Preparação de uma simulação	17
2.1.2	O Cálculo	18
2.1.3	Resultados	18
2.2	Zemax.....	19
2.3	Preparação de uma simulação.....	20
2.3.1	O cálculo e apresentação de resultados.....	21
3	Modos de transferência de calor	23
3.1	Troca de calor por radiação	23
3.2	Troca de calor por condução	24
3.3	Troca de calor por convecção	25
4	Reactor <i>SDS</i> de 1ª geração.....	26
4.1	Descrição	26
4.1.1	Estrutura	26
4.1.2	Funcionamento.....	27
4.1.2.1	Resultados típicos.....	27
4.2	Caracterização óptica do reactor	28
4.2.1	Medidas experimentais	30
4.2.1.1	Montagem experimental.....	30
4.2.1.2	Validação do sistema de medida.....	33
4.2.1.3	Resultados	35
4.2.1.3.1	Efeito das diferentes configurações de lâmpadas	35
4.2.1.3.2	Contribuição óptica do espelho plano	36
4.2.1.3.3	Contribuição óptica da tampa do reactor	39
4.2.1.3.4	Influência da reflectividade dos componentes de alumínio	41
4.2.1.3.5	Influência da janela de quartzo	44
4.2.1.3.6	Mapa global da distribuição de intensidade luminosa	45
4.2.2	Simulação da distribuição da radiação	48
4.2.2.1	Resultados	50
4.2.3	Transferência de calor por radiação.....	54
4.2.3.1	Medidas da potência óptica na amostra	54
4.2.3.1.1	Análise do problema	54
4.2.3.1.2	Montagem e procedimento experimental	55
4.2.3.1.3	Resultados	57
4.2.3.1.3.1	Característica I-V	57
4.2.3.1.3.2	Potência óptica (dT/dt).....	58
4.2.3.1.3.2.1	Distribuição longitudinal e transversal de q_{rad} na amostra	59
4.2.4	Transferência de calor por convecção e condução	61
4.2.4.1	Simulação do fluxo interior no reactor.....	61

4.2.4.1.1	Preparação da simulação.....	61
4.2.4.1.1.1	Materiais do reactor.....	61
4.2.4.1.1.1.1	Alumínio.....	61
4.2.4.1.1.1.2	Quartzo	62
4.2.4.1.1.2	Fluido.....	63
4.2.4.1.1.2.1	Hidrogénio gasoso ($H_{2(g)}$)	63
4.2.4.1.1.3	Amostra - Pó de silício	65
4.2.4.1.2	Simulação.....	65
4.2.4.1.2.1	Condições fronteiras e condições iniciais:	66
4.2.4.1.2.2	Resultados	68
4.2.5	Medidas experimentais da distribuição da deposição no filme	75
5	Projecto do reactor SDS de 2ª geração.....	78
5.1	Descrição do reactor.....	78
5.2	Análise da convecção no interior do reactor	81
5.2.1	Simulação da convecção em <i>FlowWorks</i>	81
5.2.1.1	Efeito da presença de zonas quentes.....	83
5.2.1.1.1	Uma zona quente.....	83
5.2.1.1.1.1	Numa cavidade cúbica de faces abertas	83
5.2.1.1.1.2	Numa cavidade prismática de bases abertas	85
5.2.1.1.1.3	Numa cavidade prismática fechada.....	86
5.2.1.1.2	Várias zonas quentes	88
	Duas zonas quentes	89
	Três zonas quentes	90
5.2.1.1.3	Variação da distância entre zonas quentes e da altura da cavidade	91
5.2.1.1.3.1	Variação da distância entre zonas quentes.....	91
5.2.1.1.3.2	Variação da altura da cavidade.....	92
5.2.1.1.4	Efeito de paredes internas adiabáticas juntamente com a variação da largura da cavidade	94
5.2.2	Proposta para a geometria do reactor	97
5.2.2.1	Simulação do fluxo interior no reactor.....	99
5.2.2.1.1	1ª Simulação	99
5.2.2.1.2	2ª Simulação	100
5.2.2.1.3	3ª Simulação	102
5.2.2.1.4	Comparação das distribuições de temperatura obtidas nas simulações.....	103
5.3	Análise de espelhos concentradores para o sistema de aquecimento.....	108
5.3.1	Análise de um sistema óptico concentrador de espelho elíptico.....	108
5.3.1.1	Direcção y	109
5.3.1.2	Direcção x	112
5.3.1.2.1	Potência difusa	114
5.3.1.2.2	Potência focada	115
5.3.2	Dimensionamento do espelho elíptico.....	115
5.3.2.1	Análise de desvios do filamento em relação ao foco de emissão do espelho.....	117
5.3.2.1.1	Resultado no foco (x,z) = (0,0)	118
5.3.2.1.2	Resultados dos desvios na direcção x.....	118
5.3.2.1.3	Resultados dos desvios na direcção z	120

5.3.3	Integração do sistema concentrador de radiação no reactor	122
5.3.3.1	Simulação	123
5.3.3.1.1	Resultados	124
5.3.3.1.2	Condicionamento da reflexão dos componentes de alumínio	127
5.3.3.1.2.1	Resultados	127
5.3.3.1.3	Influência da geometria do reactor	128
5.3.3.1.4	Efeito das obstruções	130
5.3.3.1.5	Influência das reflexões	131
6	Conclusões	134
7	Bibliografia	135

1 Introdução

O consumo massivo de recursos limitados como o carvão, petróleo e gás natural despertou, na segunda metade do século passado, uma explosão na investigação de fontes energéticas alternativas que tem sido potenciada pela consciência crescente dos graves impactos ambientais associados à utilização das fontes de energia poluentes.

Das fontes de energia alternativas e limpas, a energia solar destaca-se, por ser além de inesgotável, acessível em qualquer parte do globo terrestre. A evolução da tecnologia fotovoltaica assenta na procura de formas para aumentar a eficiência de conversão da radiação solar em electricidade a par da redução de custos associados.

A utilização maioritária do silício para produção de células fotovoltaicas está associada ao facto deste ser um dos elementos mais abundantes da crosta terrestre e por ser o semiconductor mais estudado de sempre devido à sua larga utilização na microelectrónica.

A qualidade do silício utilizado na produção fotovoltaica é determinante para a obtenção de boas eficiências. Os recordes alcançados foram conseguidos através do crescimento de silício monocristalino, de um grau de pureza elevadíssimo, através das técnicas conhecidas por *Czochralski* (Cz) e *Float Zone* que acarretam custos energéticos elevados. Com o silício multicristalino, que é obtido por solidificação direccional sob a forma de lingote, embora as eficiências das células sejam inferiores, a sua produção é um pouco mais barata. Todos estes processos em que se obtêm grandes cristais quer em forma cilíndrica (Cz e FZ) ou prismática (lingote), exigem o corte em bolachas (*wafers*) (elemento base da célula fotovoltaica) com espessuras de 300µm a 400µm que se traduz em perdas de 40% a 50% de material, o que corresponde a cerca de 75% do custo final de uma célula fotovoltaica. Apesar disso, a indústria fotovoltaica actual ainda depende em larga escala destas técnicas.

Espera-se que em 2050, cerca de 25% do total de energia eléctrica seja produzida por aplicações fotovoltaicas, o que só poderá ser alcançado com a redução significativa dos custos de produção. É aqui que a investigação de tecnologia de crescimento de silício cristalino, já na forma de fita para produção de células fotovoltaicas, ganha relevância. Vários processos deste tipo têm sido desenvolvidos e são denominados por técnicas de crescimento em fita (*RGT – Ribbon Growth Technologies*).

A maioria das técnicas de crescimento em fita tem como base a extracção das fitas a partir de silício fundido num cadinho. As imagens seguintes sugerem o princípio de algumas destas técnicas.

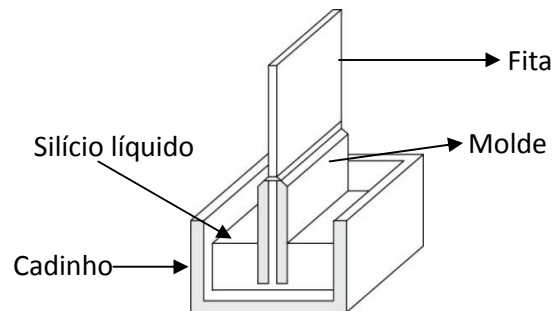


Imagem 1.1 Esquema do método EFG (*edge-defined film fed growth*) desenvolvido pela Mobil/Tyco

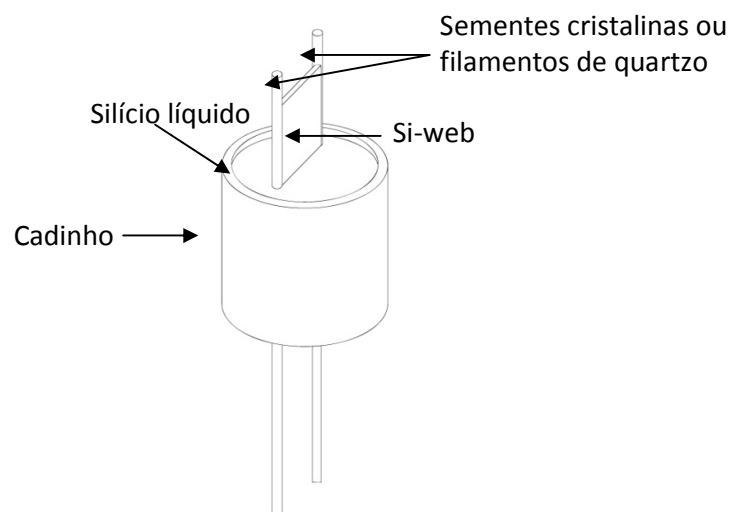


Imagem 1.2 Esquema comum das técnicas D-web (*Dendritic Web growth*), ESP (*edge-supported pulling*), SR (*String Ribbon*) que se distinguem pelo material dos filamentos de extração por capilaridade.

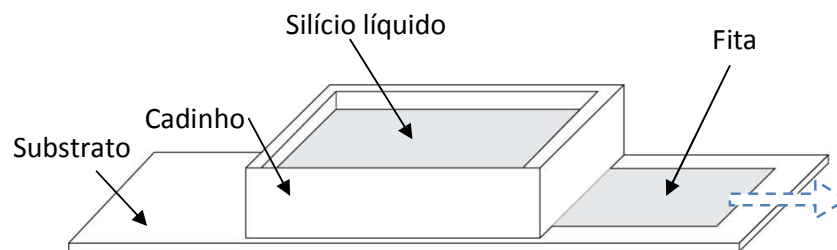


Imagem 1.3 Esquema da técnica RGS (*ribbon growth on substrate*) desenvolvido pela Bayer

Na sua maioria estas técnicas têm tido dificuldade em se imporem, principalmente devido a eficiências modestas de conversão energética (devido quer a imperfeições na rede cristalina, causadas em parte por tensões térmicas, quer à incorporação de impurezas). Até agora apenas duas técnicas *RGT* se mostraram viáveis para produção industrial, a *EFG* [1] e a *String Ribbon* [2], que já são responsáveis por cerca de 10% do volume da produção total de células fotovoltaicas.

Outra técnica recente de crescimento de fitas de silício fundido é designada por *EZ-Ribbon*, e merece especial atenção por não necessitar de um cadinho, que é o que constitui a principal fonte de impurezas. Este processo encontra-se em desenvolvimento no LAFS, que possui a sua patente. Na imagem seguinte encontra-se representado o diagrama do funcionamento da técnica. Para além da garantia de produção de silício cristalino de elevado grau de pureza, esta técnica tem a seu favor o facto de a quantidade de silício fundido em cada instante ser muito reduzida, pelo que o consumo energético é também reduzido.

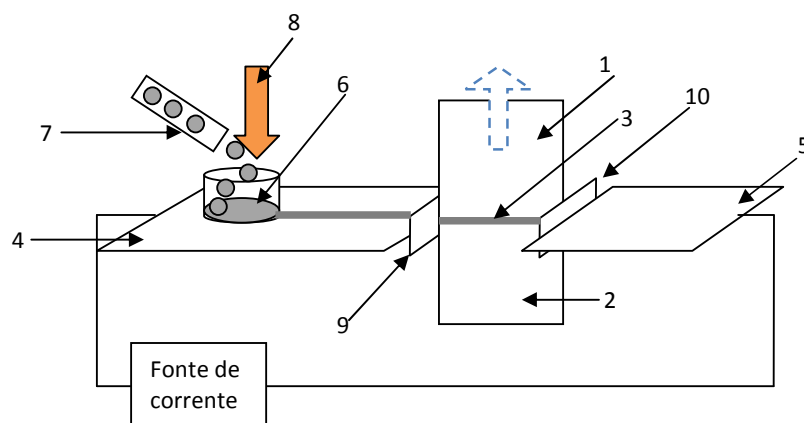


Imagem 1.4 Diagrama do processo *EZ-Ribbon*: 1-fita em crescimento, 2-fita de origem, 3-zona fundida, 4 e 5-eléctrodos de silício, 6-lago de silício fundido, 7-alimentação do lago, 8-aquecimento do lago, 9 e 10-placas intermédias. [3]

Outras técnicas de crescimento de fitas que não recorrem a silício fundido têm surgido como alternativas e garantem maior qualidade no que diz respeito à pureza. Na sua maioria consistem em aplicações CVD (*Chemical Vapour deposition*), que usam gases percursores que têm silício na sua composição, tais como $\text{Cl}_3\text{HSi}_{(g)}$ e SiH_4 . O desafio que se coloca no desenvolvimento destas técnicas está no substrato, pois se for constituído por materiais que não silício, acaba por introduzir impurezas indesejadas e, a destruição da fita devido a tensões e deformações plásticas provocadas pelo desajuste do coeficiente de expansão térmica.

mica do silício e do substrato, durante o processamento a temperaturas elevadas típicas deste tipo de processos. A hipótese de usar substratos de silício cristalino exige que este se encontre na forma desejada o que acarreta custos associados ao corte de *wafers* típicas na forma pretendida. Existem alguns trabalhos feitos neste sentido e que alcançaram custos relativamente baixos, através da utilização de substratos de silício cristalino de baixo custo [4] e por reutilização de substratos de elevada qualidade através de processos de destacamento dos filmes [5]. Geralmente, em todas técnicas são utilizados crescimentos epitaxiais a alta temperatura e baixa pressão, pelo que acabam por ser dispendiosos. É no âmbito da exploração de um processo baseado em CVD de baixo custo que surge o processo *SDS* – Ribbons, sobre o qual decorreram os estudos apresentados nesta dissertação.

1.1 Processo *SDS*

O início do estudo do processo *SDS* – *Silicon on Dust Substrate*, remonta a 1998 pelos investigadores seniores do Laboratório de Aplicações Fotovoltaicas. O objectivo deste processo é produzir fitas de silício através de uma técnica de CVD rápido em regime de baixas temperaturas e pressão atmosférica. É utilizado como precursor o elemento gasoso silano (SiH_4) que é decomposto pela seguinte reacção de pirólise :



O silício é depositado sobre uma camada fina de nano-pó de silício, obtido através de um processo de nucleação em fase gasosa do gás precursor. Este tipo de processo garante elevadas taxas de nucleação homogénea, a baixas temperaturas, de nano partículas de silício com elevada pureza e a custos relativamente baixos. Da deposição resulta um filme ($300\mu\text{m}$ - $400\mu\text{m}$) de silício nanoporoso que constitui a pré-fita, que é destacada do restante pó. O pó excedente acaba por funcionar como uma camada sacrificial reutilizável num novo leito de deposição. A pré-fita destacada é autosustentável e possui as dimensões pretendidas para a produção de células fotovoltaicas. Esta é depois recristalizada através de uma técnica de zona fundida flutuante (*ZMR* – *Zone Melting Recrystallization* [6]), da qual resulta uma fita de elevada qualidade cristalina, que é usada na produção de células fotovoltaicas de alta eficiência [7]. Todo este processo é feito sob atmosfera controlada e sem contacto com matérias contaminantes. O passo *ZMR* é também utilizado para a dopagem tipo-p da pré-fita, que ainda é de silício intrínseco. É utilizada uma técnica de vaporização com um *spray* de ácido bórico [8], também desenvolvida no laboratório LAFS, que assegura que durante a recristalização sejam incorporadas impurezas (boro) na quantidade adequada (resistividade de $1.5\Omega\text{cm}$).

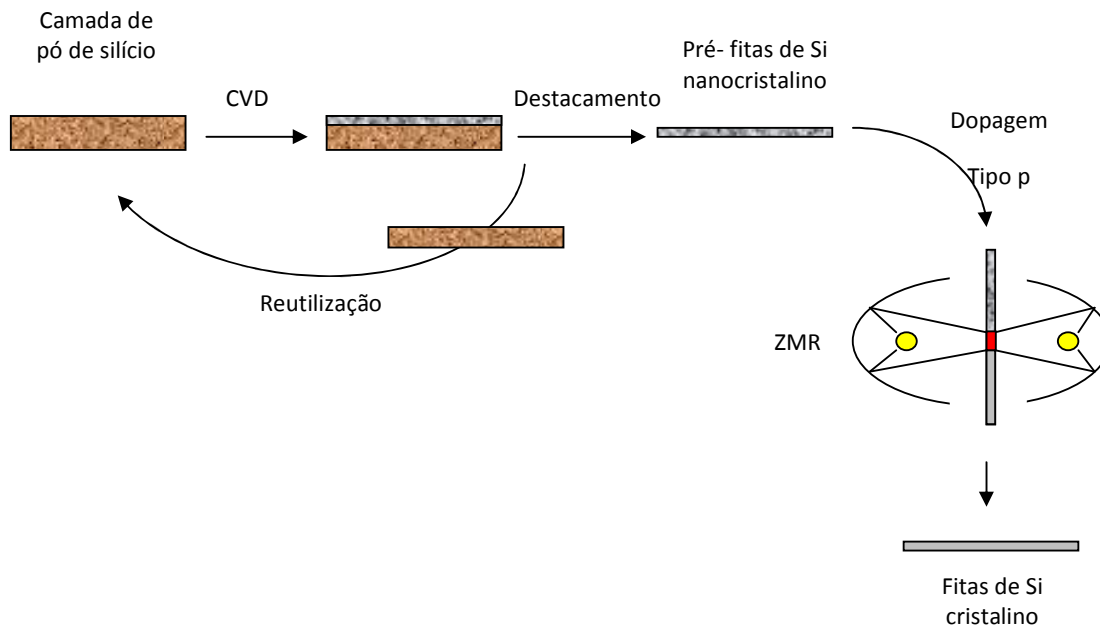


Imagem 1.5 Esquema do processo de obtenção de fitas de silício cristalino para a formação de células fotovoltaicas. [9]

As vantagens deste processo residem essencialmente na ausência de um substrato de material diferente, reduzindo o risco de contaminação e custos associados; no baixo consumo de energia associado às baixas temperaturas e à ausência de vácuo na fase CVD; pela garantia de produção fitas recristalizadas de alta qualidade cristalina.

A investigação desta técnica levou à criação de um protótipo de reactor CVD, ao qual foi chamado reactor de 1ª geração, que se descreve no capítulo seguinte. Este reactor funciona de um modo estacionário, isto é, o leito de pó é mantido no mesmo local do reactor CVD, onde é feita a deposição. Após este passo o destacamento da pré-fita é feito manualmente e prossegue-se com o passo de ZMR, já descrito. As células fotovoltaicas produzidas com material SDS constituem a melhor demonstração de todo o processo SDS.

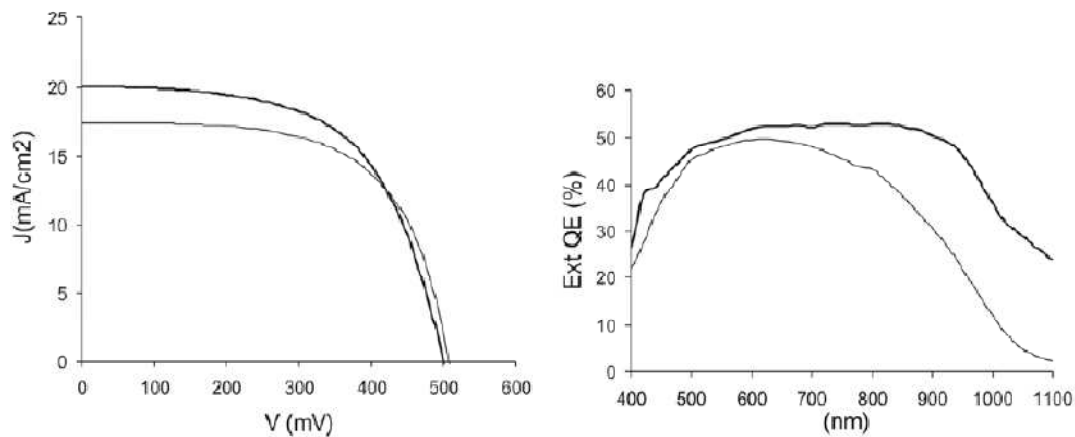


Imagem 1.6 Característica I-V e Resposta espectral para uma célula SDS (linha fina) e para uma célula de controlo feita a partir de silício multicristalino obtido por lingote (linha mais espessa) [9].

No entanto, a taxa de pré-fitas crescidas neste reactor, das quais se conseguiram obter células, foi relativamente baixa, devido essencialmente a heterogeneidades na distribuição do grau de porosidade ao longo da pré fita (como se mostrará mais adiante) que se traduz frequentemente em colapsos da zona fundida durante o passo *ZMR*. Esta razão levou à necessidade de desenvolvimento de um novo reactor de funcionamento em modo contínuo, que pretende não só resolver os problemas associados ao actual, mas também melhorar o desempenho do passo de deposição CVD.

2 Recurso à simulação – *SolidWorks/FlowWorks* , *ZEMAX*

O reactor de CVD utilizado no passo de deposição de silício sobre o pó é uma peça extremamente importante do processo SDS. Pretende-se demonstrar altas taxas de utilização do silano, baixo custo térmico, num processo compatível com uma cadeia de produção contínua. Trata-se de um estudo de dinâmica de deposição, fundamental para a exploração dos limites físicos do sistema e sua relação com a qualidade do filme obtido.

Na formação da pré-fita por CVD os pontos críticos a estudar são: efeitos de convecção na câmara de deposição do filme, difusão e decomposição do gás no leito de pó assim como a distribuição de temperatura neste. Trata-se pois de um sistema complexo que justifica o recurso a programas de simulação numérica dos fenómenos físicos envolvidos.

O recurso a *software* especializado é cada vez mais um recurso indispensável em engenharia. Programas de Desenho Assistido por Computador e simuladores estão, hoje em dia, bastante desenvolvidos e paralelamente à avançada tecnologia de microprocessadores e processamento permitem conceber desenhos técnicos com extrema facilidade e rapidez.

2.1 *FloWorks*

O *FloWorks* é uma avançada ferramenta de cálculo computacional de dinâmica de fluidos (CFD – “*Computational Fluid Dynamics*”). Desenvolvido para actuar sobre as mais complexas geometrias concebidas no software de desenho assistido por computador (CAD), *SolidWorks*, que é hoje vastamente utilizado nos mais variados ramos da indústria, desde a indústria de moldes à da aeroespacial. O *COSMOSFloWorks* permite avaliar tanto o comportamento de mecânica de fluidos como executar análises de transferência de calor nos mais diversos e complexos cenários. De entres todas as potencialidades desta ferramenta de simulação, apresentam-se na próxima listagem, recursos de maior interesse para projectos do tipo do descrito nesta dissertação:

- Análises bi e tridimensionais;
- Análises de convecção interna;
- Análises em estado estacionário e transiente (dependência temporal);
- Fluidos compressíveis e incompressíveis (densidade dependente da pressão);
- Regimes de fluxo laminar, turbulento e transitório;
- Transferência de calor convectiva e condutiva entre fluidos e sólidos;
- Transferência de calor condutiva entre sólidos;
- Resistência térmica de contacto;
- Transferência de calor radiativa entre superfícies;

- Fluxos de fluidos sob efeito gravitacional (efeito de *flutuabilidade*);
- Dinâmica de fluidos em meios porosos;

2.1.1 Preparação de uma simulação

Como em qualquer outra ferramenta de cálculo de elementos finitos, no COSMOS-Flowworks, começa-se por definir o domínio (computacional) e respectiva resolução da malha de elementos finitos. De acordo com o tipo de análise, neste caso análise de convecção interna considerando transferência de calor em sólidos, o domínio computacional é gerado automaticamente, geralmente com a forma de um prisma rectangular que envolve toda a geometria pré-concebida em CAD. Também é gerada automaticamente a malha de elementos finitos, em que o dimensionamento das células é ajustado ao modelo geométrico de modo a assegurar a mínima qualidade de resultados. O parâmetro de rede de cada célula da malha pode ser alterado manualmente neste estágio inicial ou definido para vários níveis de refinamento posteriores que podem ser requeridos ainda durante o cálculo, dependendo da exigência de qualidade de resolução dos resultados.

Na preparação do modelo para a simulação, há ainda que parametrizar os componentes sólidos, e os fluidos envolvidos. Para isso, conta-se como uma vasta biblioteca de materiais que inclui, para cada um, propriedades termodinâmicas relevantes em simulações desta natureza. Caso não exista o material, o fluido pretendido, este pode ser adicionado manualmente. As grandezas a parametrizar nos fluidos em estado gasoso (do tipo que foram usados no trabalho aqui descrito) são: a razão entre o calor específico a pressão constante e a volume constante (C_p/C_v), massa molecular (Kg/mol), variação da viscosidade dinâmica ($\text{Pa}\cdot\text{s}$) ao longo da temperatura (K), variação do calor específico ($C_p = [\text{J}\cdot\text{Kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}]$) com a temperatura e a dependência da condutividade térmica ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) com a temperatura. No caso dos componentes sólidos: densidade ($\text{Kg}\cdot\text{m}^{-3}$), calor específico ($\text{J}\cdot\text{Kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$), tipo de condutividade térmica (isotrópica, unidireccional, aximétrica e ortotrópica), dependência da condutividade térmica ($\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$) com a temperatura e a temperatura respectiva ao ponto de fusão.

O próximo passo é estabelecer as condições iniciais e de fronteira do modelo. As condições de fronteira, no estudo de convecção natural interna, resumem-se a definir a rugosidade, temperatura e/ou coeficiente de transferência de calor nas faces internas (que podem também ser apenas consideradas adiabáticas) do modelo geométrico e as condições de fluxo e pressão nas interfaces entre o domínio do fluido e o exterior e ainda se necessário definem-se condições de simetria no domínio computacional. Outro tipo de condição fronteira a estabelecer no modelo é a atribuição da qualidade de fonte de calor ou de radiação às superfícies ou volumes pretendidos, acompanhada pela respectiva temperatura, taxa de geração de calor ($Q(W)$), fluxo de calor ($q(w/m^2)$ ou (w/m^3)) ou emissividade. Quanto às

condições iniciais, fixam-se os valores de temperatura iniciais do fluido e das faces internas dos componentes sólidos.

2.1.2 O Cálculo

O cálculo feito pelo algoritmo do *FloWorks* é baseado na discretização das equações de Navier-Stokes em (x,y,z,t) cujas soluções são resolvidas iterativamente ao longo da malha definida como domínio computacional, que vai sendo refinada ao longo do cálculo. Uma vez que mesmo para problemas estacionários o cálculo é feito em condições de dependência temporal este só termina quando for alcançada uma qualquer condição definida pelo utilizador. As condições limite disponíveis são: um número máximo de refinamentos, um número máximo de iterações, tempo limite de cálculo e convergência dos resultados pretendidos.

2.1.3 Resultados

Ainda antes de dar início ao cálculo é necessário definir quais as grandezas que se pretendem fazer convergir. Cada um destes parâmetros pode ser obtido em relação a qualquer superfície, volume ou ponto de todo o domínio válido do modelo. Nos trabalhos desenvolvidos exploraram-se os seguintes parâmetros: Pressão, temperatura do fluido e dos componentes sólidos, e velocidade (módulo e componentes x,y e z).

Os resultados do cálculo são disponibilizados em formato EXCEL e ficheiros ASCII. Embora também possam ser visualizados em ambiente gráfico, combinados com a geometria. Destes apontam-se, como de maior utilidade para o tipo de análises executadas neste projecto, as seguintes:

- *Cut Plot* (gráfico de corte) - permite visualizar a distribuição de qualquer parâmetro num determinado corte do domínio computacional sob a forma de gráficos de contornos, isolinhas ou vectores ;
- *Surface Plot* (gráfico de superfície) – permite visualizar a distribuição de qualquer parâmetro numa qualquer superfície sob a forma de gráficos de contornos, isolinhas ou vectores;
- *Flow trajectories* (trajectórias de fluxo) – permite visualizar o fluxo do fluido em análise através da representação de trajectórias de partículas infinitesimais de fluido;
- *Animation* (animação) – proporciona a visualização da variação de qualquer parâmetro cuja a distribuição está representada sob a forma de qualquer tipo de gráfico ao longo do tempo, em análises temporais, ou ao longo das iterações do cálculo, em análises em estado estacionário.

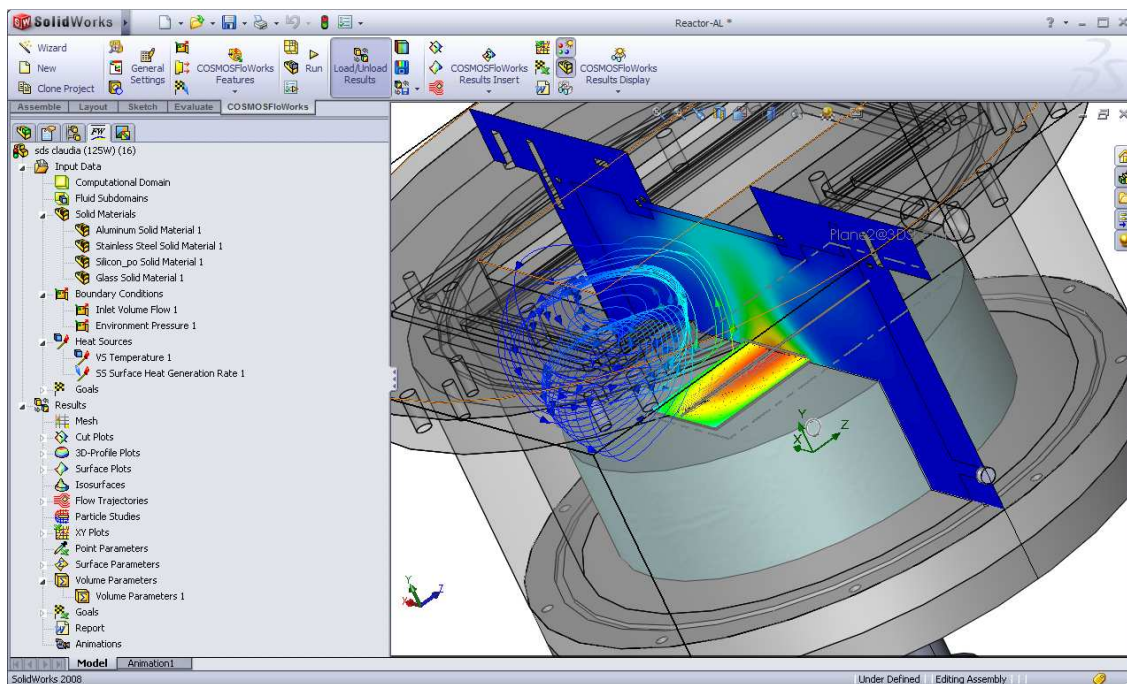


Imagem 2.1 Ambiente de trabalho da plataforma FloWorks no SolidWorks.

Aqui foi descrita apenas uma pequena parte dos recursos do *FloWorks* que foram exploradas no decorrer dos trabalhos descritos nesta dissertação. No entanto a sua potencialidade para caracterização ou projecto, que requeira análise de dinâmica de fluidos e dos vários modos de transferência de calor, vai muito além do que aqui se utilizou por limitação de tempo e recursos computacionais.

2.2 Zemax

O software *ZEMAX*[®] é uma útil e avançada ferramenta de desenho, análise e optimização de sistemas ópticos. É usado nas mais diversas aplicações, por exemplo, no desenvolvimento de tecnologia de imagiologia, de ecrãs, sistemas laser, sensores, desenho de lentes, iluminação, entre outras. É um simulador *ray-tracing* que opera em espaço tridimensional, proporcionando um vasto leque de ferramentas que permitem estudar sistemas de óptica sequencial e óptica não sequencial sob o ponto de vista da propagação física óptica (POP), optimização de sistemas, tolerância (interferometria), óptica difractiva, análises térmicas, etc. Pela sua larga aceitação na indústria e investigação académica, dispõe de bibliotecas de produtos ópticos das marcas mais recorrentes neste campo, assim como de propriedades ópticas de materiais.

No trabalho descrito nesta dissertação o *ZEMAX* foi explorado essencialmente no campo do *ray-tracing* não sequencial¹. Foi usado na caracterização óptica do sistema óptico desenvolvido para o reactor *CVD SDS Ribbons* e no dimensionamento de um sistema óptico para futura aplicação da próxima geração do reactor. As análises executadas com o recurso a este software apenas exploram a capacidade deste poder importar geometrias concebidas noutros assistentes de CAD, assim como a sua capacidade de definir objectos paramétrica-mente, testar o efeito de materiais de revestimento (*coatings*), observar a distribuição de radiação proveniente de fontes múltiplas e complexas.

2.3 Preparação de uma simulação

O *ZEMAX*, como já referido, permite importar geometrias de outros *softwares* CAD ou concebe-los a partir de geometrias básicas já disponíveis ou, por via de parametrização geométrica. Depois da concepção geométrica do sistema óptico, são atribuídas propriedades ópticas dos materiais que serão utilizadas no cálculo a nível de reflexões, refacções e dispersões dos raios.

De seguida incluem-se as fontes luminosas, que mais uma vez se encontram disponíveis num vasto leque de variedade nas bibliotecas do *ZEMAX*. Estas podem ser fotodíodos, de propagação gaussiana, pontuais, radiais, rectangulares, tubulares, de revolução axial, elípticas, filamentosas ou ainda definidas pelo utilizador via programação. Para cada tipo de fonte existem diversos parâmetros editáveis que definem o comportamento radiativo, tanto a nível energético como geométrico. Nesta tese apresentam-se resultados obtidos com fontes na forma de filamento, para as quais é possível definir o material que o constitui, o seu espectro de emissão, tamanho (comprimento e espessura), número de voltas do enrolamento, localização no espaço e número de raios disponíveis para análise. A distribuição de raios das fontes tipo filamento é feita segundo uma distribuição uniforme, em número, ao longo da superfície útil para emissão. No entanto cada raio é emitido numa orientação aleatória.

Por fim, devem definir-se qual ou quais das superfícies funcionaram com detectores. Estas funcionaram como absorsores de radiação ideais uma vez que posteriormente ao cálculo se podem aplicar diversos tipos de filtros aos resultados.

Atribuídas todas as propriedades ópticas aos componentes que constituem o sistema, o modelo encontra-se pronto para simulação *ray-tracing*.

¹ *Ray tracing* não sequencial significa que os raios são traçados apenas ao longo do caminho fisicamente realizável até interceptarem um objecto. Aí podem ser refractados, reflectidos ou absorvidos dependendo das propriedades ópticas do objecto. Assim esses raios podem continuar num novo caminho, podendo até voltar a colidir com o mesmo objecto múltiplas vezes.

2.3.1 O cálculo e apresentação de resultados

O Zemax utiliza o modelo de *Ray-trace Monte Carlo* [10]. Cada pixel do detector no início da simulação tem o valor igual a 0. Quando iniciada a simulação, o valor de potência óptica atribuída a cada fonte é dividido pelo número de raios que serão traçados a partir dessa fonte. Para obter distribuições de energia mais precisas no detector, geralmente é necessário um grande número de raios. Quando são seleccionados grandes números de raios, a tarefa de *ray-tracing* é dividida em várias subtarefas, que são processadas paralelamente em diferentes processadores (no máximo 16), que no caso dos trabalhos decorridos foram dois. A divisão em subtarefas permite que em casos de múltiplas fontes, em cada momento da simulação existam raios provenientes de cada fonte. O número de subtarefas é determinado para que sejam em número correspondente a uma potência de 2 ou 5 e que em cada uma estejam integrados o mesmo número de raios. O modelo tem por limite 1024 subtarefas, cada uma com no mínimo 400 raios para tratar, como tal para grandes número de raios associados a uma fonte são aconselhados 10000, 250000, 500000, 1000000 e 5000000.

Durante o *ray-tracing* de *Monte Carlo* cada raio é sujeito a reflexões, refacções e dispersões que juntamente com a lei do inverso da distância ao quadrado promovem a perda de energia ao longo da sua trajectória. A energia com que cada raio chega ao detector é registada numa matriz, com um número de entradas igual ao número de *pixels*, que pode ser acedida com valores de potência por unidade de área em função da posição espacial do detector (W/m^2) relativos a radiação incoerente ou coerente, de potência por unidade de ângulo sólido (W/sr^2), de potência por unidade de área por ângulo sólido ($W/m^2/sr$) e ainda, em unidades de fluxo incidente (W) no caso de detectores tridimensionais cuja a matriz tem mais uma dimensão e o número de entradas corresponde ao número de *voxels*. O acesso a estas matrizes é feito por exportação de ficheiros *.txt ou em vários tipos gráficos no próprio ambiente ZEMAX. Estes gráficos podem ser de superfície ou unidimensionais (relativos a secções da geometria do detector).

O tempo requerido para cada simulação depende essencialmente do número de raios envolvidos, uma vez que este pode ser largamente amplificado em separações passíveis de ocorrer em refacções. Mas depende também da complexidade da geometria das superfícies sujeitas à simulação.

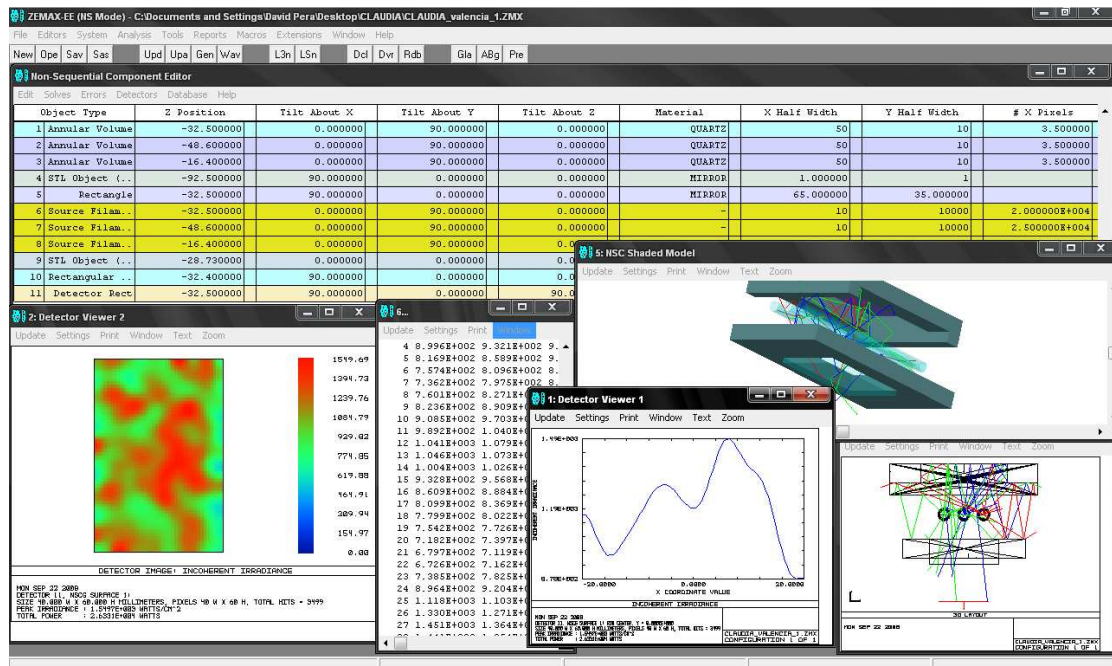


Imagem 2.2 Ambiente de trabalho do simulador *ray-tracing* ZEMAX.

3 Modos de transferência de calor

Na interpretação dos resultados das análises apresentadas nesta dissertação, foi por vezes necessário ter presentes os princípios da teoria dos vários modos de transferência de calor. Para tal recorreu-se ao livro “*Fundamental of Heat and Mass Transfer*”[11] ,como principal fonte bibliográfica. Contudo achou-se conveniente fazer-se, aqui, a enunciação fundamental destes princípios.

3.1 Troca de calor por radiação

Toda a matéria com uma temperatura finita emite energia por radiação, a radiação térmica. O fluxo de calor (W/m^2) é emitido por uma superfície é descrito pela lei de *Stefan-Boltzmann*:

$$q = \varepsilon \sigma T_s^4 \quad (3.1)$$

Onde T_s é a temperatura absoluta da superfície (K), σ é a constante de *Stefan-Boltzmann* ($5.67 \times 10^{-8} \text{ W/(m}^2 \cdot \text{K}^4)$) e ε a emissividade da superfície. Este tipo de troca é mediado por ondas electromagnéticas pelo que não exige a presença num meio material, sendo por isso mais eficiente no vácuo.

Quando existe a transferência de calor por radiação entre dois corpos, considerando que as suas emissividades são iguais à absorvidade (coeficiente que pondera a taxa de radiação absorvida na superfície - α) a taxa de calor por unidade de área entre elas pode ser descrita de acordo com a seguinte expressão:

$$q_{rad} = \frac{Q}{A} = \varepsilon \sigma (T_s^4 - T_{s2}^4) \quad (3.2)$$

para o caso da área da segunda superfície possuir uma área muito superior à de área A. (T_{s2} temperatura da superfície de maior área). Neste caso simples não é necessário considerar factores de vista entre as superfícies e a emissividade da maior superfície não influencia a taxa de transferência de calor.

Geralmente, lineariza-se a expressão que depende da diferença das potências à quarta das temperaturas das superfícies:

$$q_{rad} = h_r (T_s - T_{s2}) \quad (3.3)$$

Em que se define h_r como o coeficiente de transferência radiativa, expresso por:

$$h_r = \varepsilon \sigma (T_s - T_{s2})(T_s^2 + T_{s2}^2) \quad [W/(m^2 \cdot K)] \quad (3.4)$$

3.2 Troca de calor por condução

A condução de calor como em todos os outros modos de trocas de calor acontece sempre que se estabelece um gradiente de temperatura. A energia transferida por unidade de tempo por condução é descrita pela lei de *Fourier*. Considere-se uma parede de largura L com a distribuição de temperatura $T(x)$, a taxa de transferência de calor por unidade de área é dada por:

$$q_x = -k \frac{dT}{dx} = -k \frac{T_1 - T_2}{L} \quad (3.5)$$

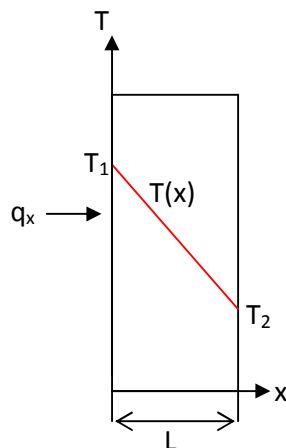


Imagem 3.1 Condução de calor por condução numa parede unidimensional de lado L .

Em que o k ($W/(m \cdot K)$) corresponde ao coeficiente de condutividade térmica característico do material da parede sinal negativo aparece pela transferência de temperatura se dar no sentido decrescente. Se a parede, plana tiver uma área de superfície igual a A , a taxa de transferência de calor através da parede é dada por:

$$Q_x = -k A \frac{\Delta T}{L} \quad (3.6)$$

3.3 Troca de calor por convecção

Este modo de transferência de calor envolve dois mecanismos fundamentais, a transferência energética por difusão (movimento molecular aleatório) e a energia transferida por movimento de massa dos fluidos.

Na sua forma mais básica, pode-se descrever o fluxo de calor convectivo (W/m^2) a partir da seguinte expressão, conhecida pela lei de Newton para arrefecimento:

$$q_{cv} = h_{cv} (T_s - T_{\infty}) \quad (3.7)$$

E que corresponde à taxa de calor por unidade de área transferida entre uma superfície e um fluido. O termo h_{cv} corresponde ao coeficiente de transferência de calor por convecção, T_s é a temperatura de uma superfície e T_{∞} é a temperatura do fluido. O fluxo será positivo se o calor estiver a ser transferido da superfície ($T_s > T_{\infty}$), se a superfície estiver a ser arrefecida, e negativo se o calor estiver a ser transferido para a superfície ($T_{\infty} > T_s$), promovendo o seu aquecimento.

O coeficiente de transferência convectiva de calor depende da natureza do escoamento do fluido. Esta pode ser classificada de convecção forçada, quando o escoamento do fluido é provocado por forças externas, ou de convecção natural, quando o fluido é sujeito a forças de flutuabilidade. Ambos os modos de convecção, podem ocorrer em regimes de fluxo laminar ou turbulento. Em alguns casos podem ocorrer a combinação de convecção forçada e natural, com fluxos laminares ou turbulentos, que com pesos diferentes para a definição de h_{cv} .

4 Reactor SDS de 1ª geração

4.1 Descrição

4.1.1 Estrutura

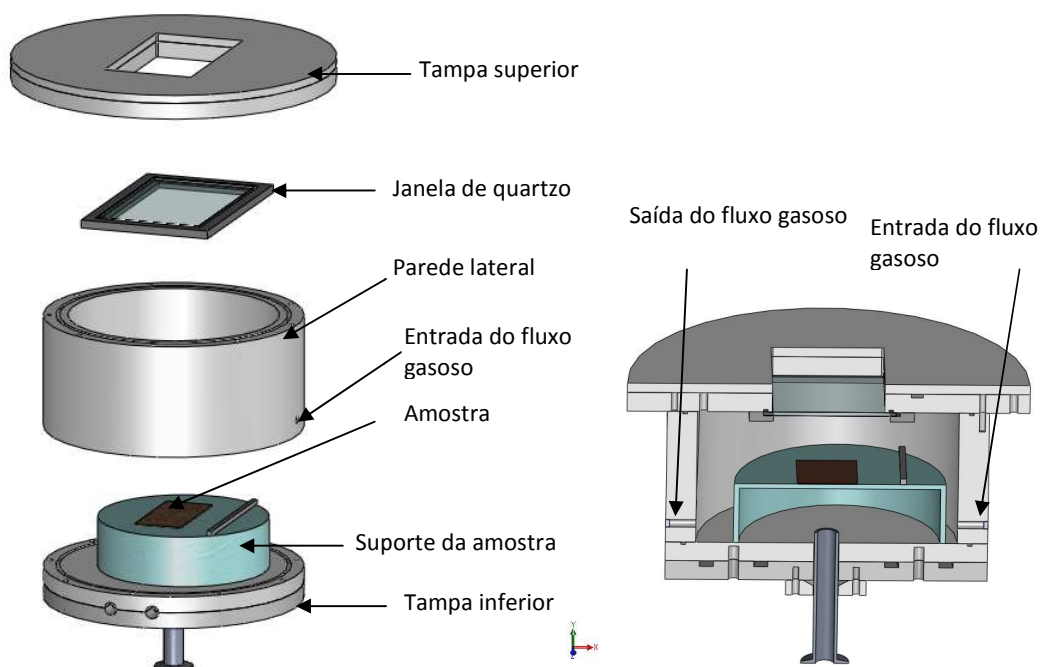


Imagem 4.1 Esquema do reactor SDS de 1ª geração. À esquerda, vista em perspectiva da estrutura desmontada. À direita, vista da secção transversal em relação à amostra.

Nota: A geometria desenhada em *Solidworks* apresentada na Imagem 4.1 foi cedida por Cláudia Rodrigues Pinto, assim como os direitos de a utilizar e modificar para análises em *FloWorks*, apresentadas nesta dissertação.

O reactor SDS de 1ª geração utiliza um sistema de aquecimento por via de radiação. O sistema é composto por uma placa permutadora de calor arrefecida a água, à qual está acoplado um espelho plano e uma moldura de alumínio que serve de suporte a um conjunto de seis eléctrodos que fornecem corrente eléctrica a três lâmpadas de filamento (de 1250 W, 1000W e 1250W, respectivamente). O conjunto encontra-se disposto de forma a que as lâmpadas fiquem paralelas e centradas em relação ao substrato (amostra).

A estrutura base do reactor é cilíndrica. É constituído por uma parede lateral tubular e tampas inferior e superior, circulares, feitas de alumínio e arrefecidas a água. Na tampa superior encontra-se uma abertura que juntamente com uma placa de quartzo de faces paralelas, constitui a janela por onde passa a radiação para o interior da cavidade do reactor.

No interior, possui o suporte (de quartzo) da amostra também cilíndrico mas não concêntrico ao reactor, munido de uma vareta de quartzo (“picoleta”) disposto paralelamente à amostra no lado da entrada de gás. A disposição destes elementos no interior do reactor é fruto do conhecimento adquirido ao longo de várias experiências que tiveram como objectivo o aperfeiçoamento da geometria a alcançar melhores resultados quanto à uniformidade do filme depositado.

Orientadas segundo o plano vertical que intersecta transversalmente a amostra, encontram-se dois ductos que correspondem à entrada e saída do gás. A entrada é feita através de um fluxo controlado e a saída encontra-se à pressão atmosférica, ligada a uma tubagem que escoar o gás para o exterior do edifício.

4.1.2 Funcionamento

O sistema óptico de aquecimento encontra-se ligado a um VARIAC, que permite controlar a potência eléctrica das lâmpadas e assim, a intensidade da radiação por unidade de área incidente na amostra.

A injeção do gás é feita através de válvulas munidas de debitómetros controlados por computador, assegurando o rigor da mistura gasosa, silano em 10 % de hidrogénio, e maior segurança.

O processo CVD inicia-se com uma lavagem do reactor com argón e depois com hidrogénio, e só depois se injecta a mistura gasosa nas proporções pretendidas. Durante a deposição, o fluxo da mistura gasosa é mantido em 0.4 litros/minuto. A temperatura alcançada no centro da amostra encontra-se tipicamente compreendida entre os 750 °C - 800°C. A amostra de pó de silício possui 0.5 mm de espessura, 12cm² (3 cm x 6 cm) de área e densidades compreendidas entre 0.23-0.29 g/cm³.

4.1.2.1 Resultados típicos

Para as condições de fluxo e temperaturas indicadas, registaram-se taxas de deposição compreendidas entre os 6µm - 8µm por minuto [7].

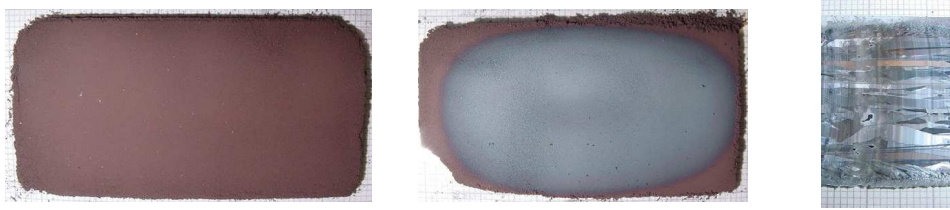


Imagem 4.2 Fotografias da amostra de pó de silício (3 cm x 6 cm) , à esquerda ; da pré-fita depositada sobre o pó ,ao centro; e fita de silício cristalino após a recristalização por ZMR, à direita (3cm de largura e 300 μ m de espessura [9]).

4.2 Caracterização óptica do reactor

Com vista a compreender os perfis de deposição de silício nos substratos de pó obtidos no reactor CVD *SDS Ribbons* procedeu-se ao estudo dos vários tipos de transferência de calor que ocorrem no reactor. Sendo a fonte energética do sistema um sistema radiativo, tornou-se essencial caracterizar o reactor do ponto de vista óptico. Para este estudo procurou-se compreender o papel desempenhado por cada componente do sistema óptico, aceder à distribuição de radiação ao longo da área da amostra e comparar os resultados com os de simulação *Ray Tracing* em situações homólogas.

O sistema de aquecimento óptico é composto por (Imagem 4.3):

- um conjunto de três lâmpadas de halógeno, *Osram Halogen Photo Lamp*, dispostas em série, paralelas entre si, e de potências respectivas 1000W, 1250W e 1000W;
- um espelho plano de alumínio;
- uma moldura de alumínio não polido;
- e uma placa de cobre permutadora de calor.

Considerou-se também a tampa superior do reactor como um componente com influência significativa na distribuição da radiação ao longo da área da amostra.

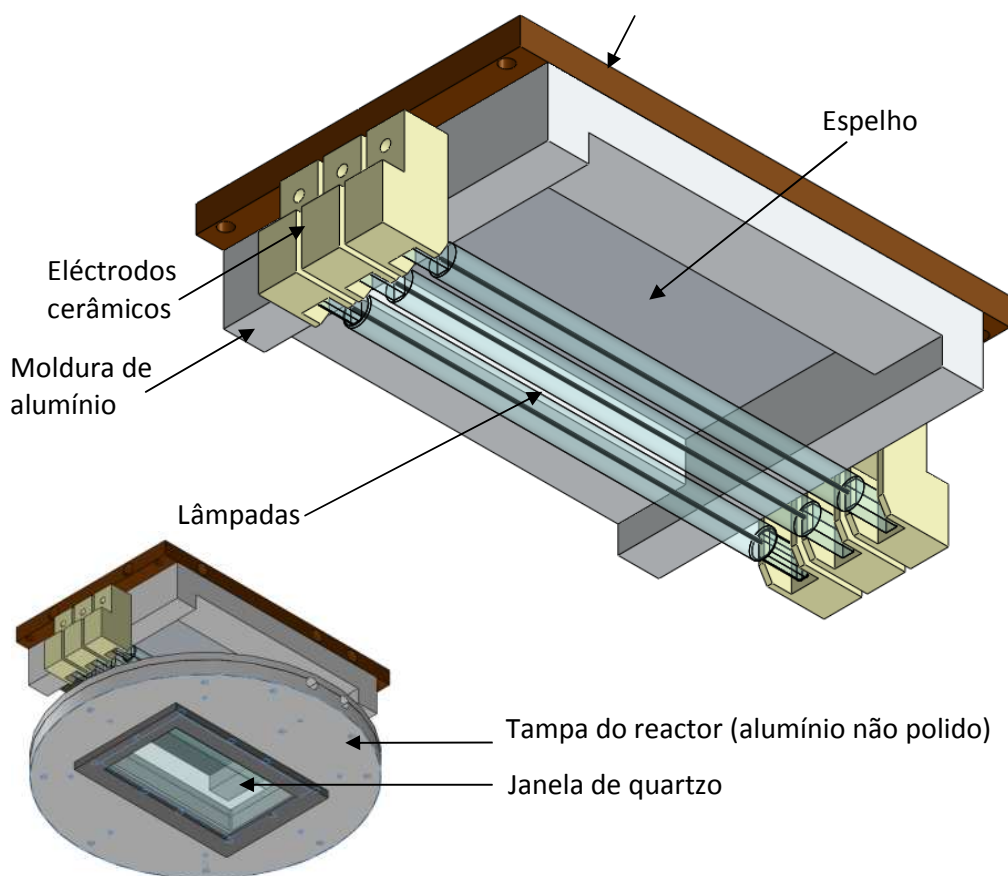


Imagem 4.3 Esquema do sistema óptico de aquecimento do reactor SDS de 1ª geração.

Foram levados a cabo estudos de variações de geometria consideradas relevantes para compreender o efeito de cada componente do sistema. As configurações seleccionadas foram seguintes:

A – Uma lâmpada				
B1-Apenas lâmpada central	C1 - Ausência de espelho		F1- Reflectividades não condicionadas	
	C2 - Presença de espelho	D2 - Sem tampa do reactor		F2- Reflectividade das molduras de alumínio reduzida
		D1 -Tampa do reactor	E1 - Com janela de quartzo	
			E2 - Sem janela de quartzo	
B2- Lâmpadas extremas				
B3 – Todas as lâmpadas				

Imagem 4.4 Diferentes configurações do sistema óptico seleccionadas para o estudo da distribuição da radiação no reactor SDS de 1ª geração.

O estudo de cada uma das configurações anteriores, consistiu em medir o perfil de intensidade luminosa num alvo, de área idêntica à das amostras de pó, sob o efeito de três configurações diferentes das lâmpadas e diferentes níveis de reflectividade dos componentes metálicos.

4.2.1 Medidas experimentais

4.2.1.1 Montagem experimental

Para a execução das medidas experimentais da distribuição de intensidades de radiação na amostra foi necessário reproduzir a geometria do reactor numa nova montagem sem a parede lateral pois a sua presença limitaria a liberdade de movimentos de translação do equipamento de medida e o seu manuseamento. Considerou-se que a ausência da parede lateral pouco significativa, uma vez que a sua geometria cilíndrica não apresenta propriedades concentradoras de radiação e o factor de vista entre ela e a fonte de radiação é mínimo e logo negligenciável.

Para a medição da intensidade de radiação ao longo da área da amostra foi usado um fototransistor (BPX25) associado a um circuito amplificador/inversor (Imagem 4.7) e acoplado a um dispositivo difusor (Imagem 4.8). Este último oferece simultaneamente uma base de suporte ao circuito e permite captar radiação num ângulo sólido de 2π estereorradianos através de um orifício de 2mm de diâmetro coberto com um painel translúcido que funcionou como difusor de radiação. O dispositivo difusor encontra-se integrado numa mesa de translação bidireccional (XY) (Imagem 4.6), de controlo manual por parafusos de precisão milimétrica. A alimentação eléctrica das lâmpadas foi feita através de uma fonte de tensão *Sorenesen LM 30-6*. Em operação normal as lâmpadas são alimentadas por um VARIAC. No entanto as flutuações da rede eléctrica levam a flutuações na potência dissipada nas lâmpadas. Na caracterização da distribuição da radiação pretendeu-se evitar estas variações pelo que se optou por usar uma fonte de tensão regulada que assegura uma potência estável independentemente de variações na rede.

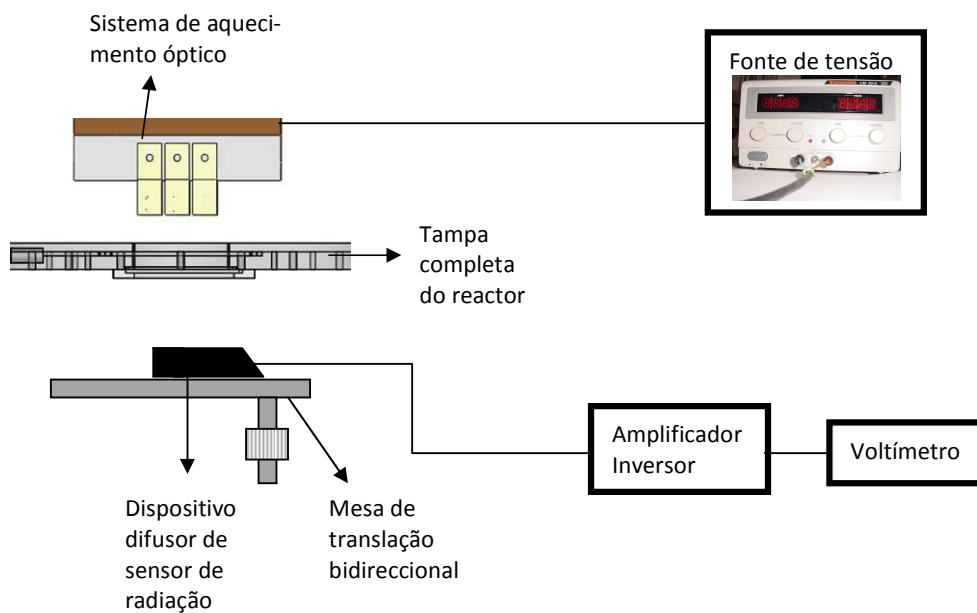


Imagem 4.5 Esquema de blocos da montagem experimental da medição da distribuição da radiação no reactor SDS de 1ª geração.

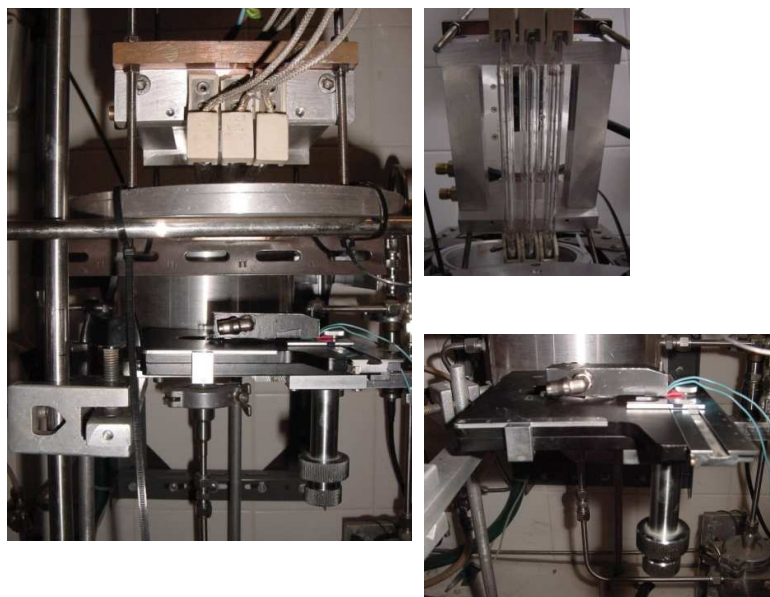


Imagem 4.6 Fotografias da montagem experimental da medição da distribuição da radiação no reactor SDS de 1ª geração (montagem completa à esquerda, sistema óptico à direita superior e mesa de translação e fotosensor à direita inferior).

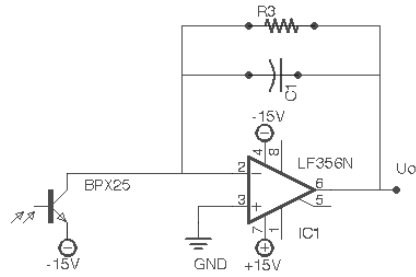


Imagem 4.7 Esquema do circuito fotosensor. ($R3 = 10^5 \Omega$, $C1 = 20\mu F$)

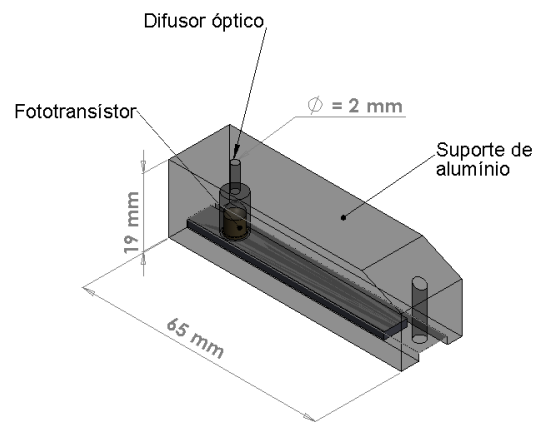


Imagem 4.8 Esquema tridimensional do dispositivo de difusão óptica com o fototransistor no seu interior.

Aqui serão apresentados e discutidos apenas os resultados considerados mais relevantes para o estudo da contribuição óptica de cada componente no sistema de iluminação. Considerou-se, para este estudo comparativo que os perfis de intensidade ao longo da linha central de orientação transversal (x) que passa pelo centro da amostra (Imagem 4.9), seria o suficiente para caracterizar cada configuração.

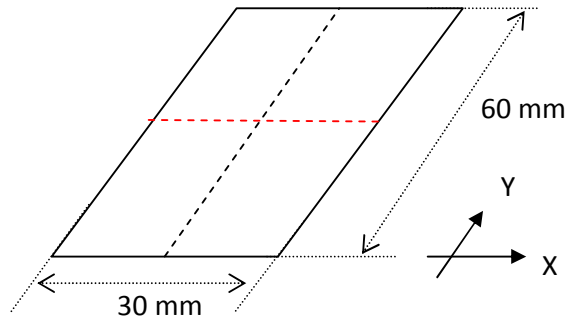


Imagem 4.9 Esquema da amostra. As medições do perfil de distribuição da intensidade da radiação incidente na amostra foram feitas ao longo da linha transversal, representada a tracejado vermelho.

Para cada uma das medidas efectuadas assegurou-se a estabilização da emissão de radiação das lâmpadas através de um período de espera de cerca de 45 – 60 minutos em que o sistema esteve ligado com uma potência idêntica à utilizada nas medições. A temperatura nos filamentos das lâmpadas (elementos resistivos) é estabilizada, minimizando flutuações na potência dissipada pelas lâmpadas.

4.2.1.2 Validação do sistema de medida

Para o teste do sistema de medida, recorreu-se a uma configuração simples que consiste apenas numa lâmpada, idêntica às utilizadas no sistema óptico do reactor, de filamento linear com um diâmetro de 12 mm. Comparou-se o resultado experimental com uma solução analítica simplificada deste problema para a direcção perpendicular ao filamento, que corresponde à seguinte equação [12], cujo desenvolvimento é feito mais adiante na secção VIII.3:

$$P(x) = \frac{P}{2\pi LD} \frac{1}{1 + \left(\frac{x - x_0}{D}\right)^2} \quad (4.1)$$

Em que L corresponde ao comprimento do filamento da lâmpada e D à distância entre este e o fotossensor. Esta solução foi obtida considerando o filamento de comprimento infinito e apenas se considera a emissão radial em cada ponto do filamento, e fenómenos

como refrações dadas no invólucro da lâmpada são ignoradas assim como a própria existência deste.

A medição foi feita de acordo com o diagrama da Imagem 4.10, em que D é igual a 9 mm e $L = 100$ mm:

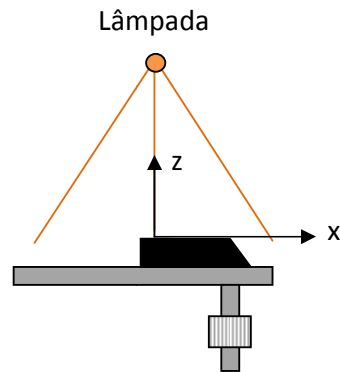


Imagem 4.10 Diagrama da medida de teste para a validação do sistema de medição.

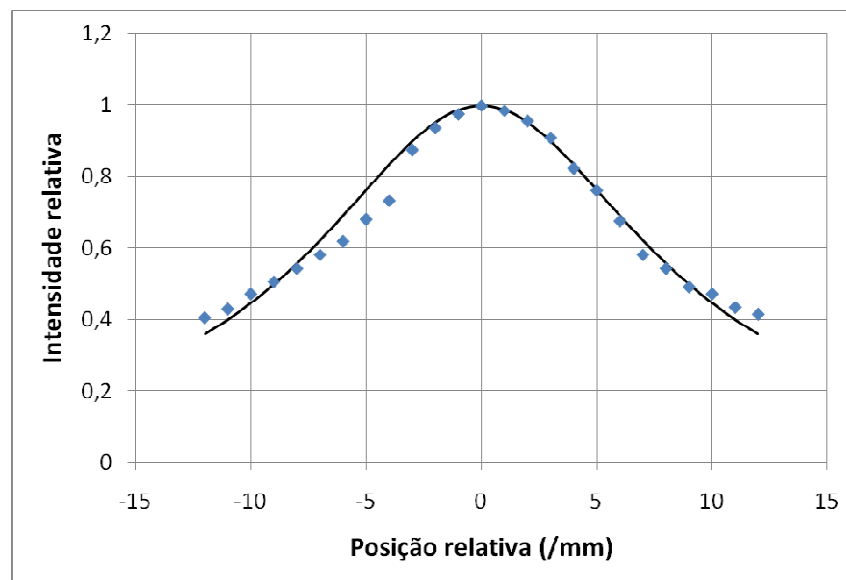


Imagem 4.11 Comparação dos valores experimentais (pontos) com os valores teóricos (linha) para a configuração simples de uma lâmpada.

O resultado foi extremamente satisfatório tendo em conta o tipo de fontes de erro associadas a experiência quer no posicionamento da lâmpada e sensor, quer no próprio sistema de translação manual.

4.2.1.3 Resultados

4.2.1.3.1 Efeito das diferentes configurações de lâmpadas

As seguintes medições tiveram como objectivo compreender o papel desempenhado por cada lâmpada no perfil de intensidade utilizado no reactor. Para tal mediram-se os perfis de intensidade resultantes da presença das três lâmpadas, das duas lâmpadas extremas e com apenas da lâmpada central. Na montagem experimental só não está incluída a tampa do reactor, deixando o sistema óptico resumido à moldura de alumínio, espelho e lâmpadas.

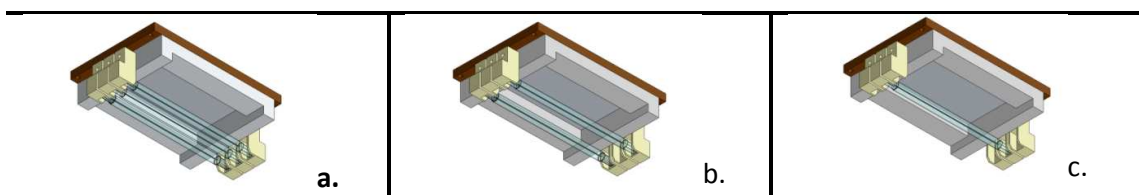
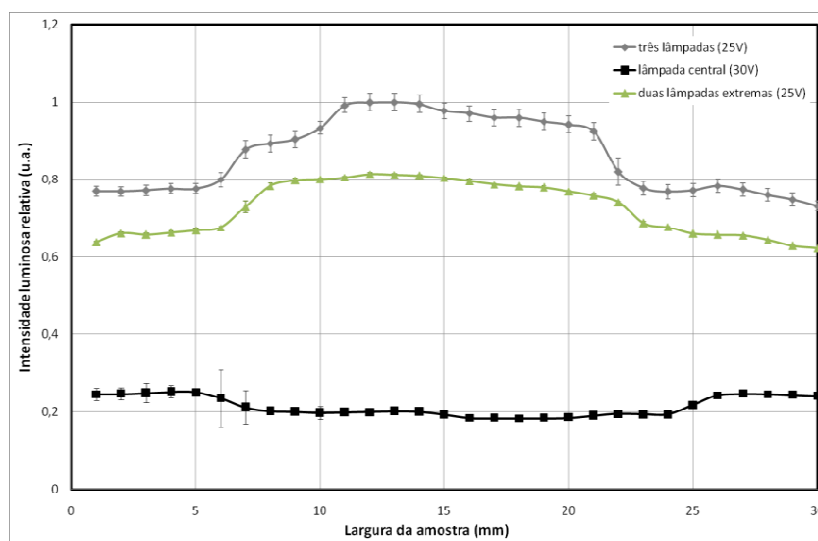


Imagem 4.12 – Perfis de intensidade obtidos para três configurações de iluminação. a- três lâmpadas, b- duas lâmpadas, c- uma lâmpada.

De imediato se pode concluir que do uso da lâmpada central, resulta um perfil de intensidade praticamente plano quando comparado com os obtidos nas outras configurações. Em consequência, o perfil obtido para as três lâmpadas é muito idêntico ao das duas extremas mas mais intenso pois integra também a intensidade da lâmpada central. Contudo, atendendo ao facto de os erros experimentais serem diminutos, as pequenas diferenças entre os perfis de intensidade obtidos para as configurações de duas e três lâmpadas podem ser consequência da lâmpada central, cujo perfil embora quase plano, comparado com os

outros, apresenta uma “bossa” de fraca intensidade dos 10 mm aos 15mm tal como no das três lâmpadas. Verifica-se também que nos primeiros e últimos 5mm extremos apresenta um ligeiro aumento de intensidade. Estas particularidades do perfil de intensidade obtido para a configuração de uma lâmpada juntamente com a existência de um patamar central mais intenso nas outras duas configurações, são reveladoras de que a estrutura de suporte das lâmpadas (ou moldura) e o espelho têm um efeito inesperado na óptica do sistema. Neste sentido tornou-se necessário aprofundar o estudo da importância destes componentes do sistema óptico.

Nas restantes experiências, tal como no resultado anterior, verificou-se que a principal diferença entre as configurações de duas e três lâmpadas foi apenas o aumento de intensidade pelo que daqui adiante se abandona a apresentação dos resultados relativos à configuração de duas lâmpadas. Em reforço a esta decisão, chama-se à atenção para o facto de a análise do caso da lâmpada central ser um bem conhecido e mesmo intuitivo (o utilizado para validar o sistema de medida – secção 4.2.2).

4.2.1.3.2 Contribuição óptica do espelho plano

Apenas lâmpada central

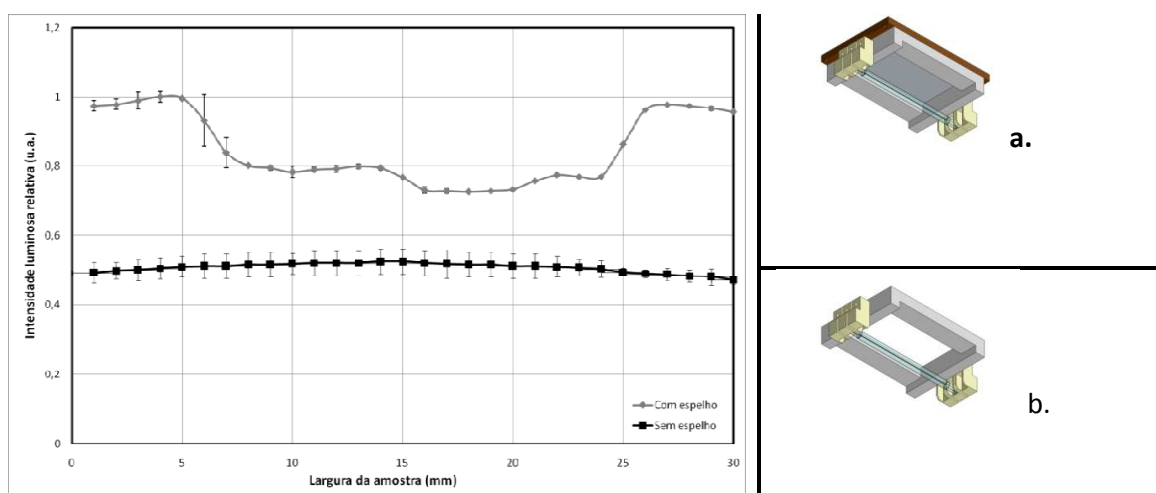


Imagem 4.13 – Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de uma lâmpada central, para os casos: a - com espelho, b - sem espelho.

Três lâmpadas

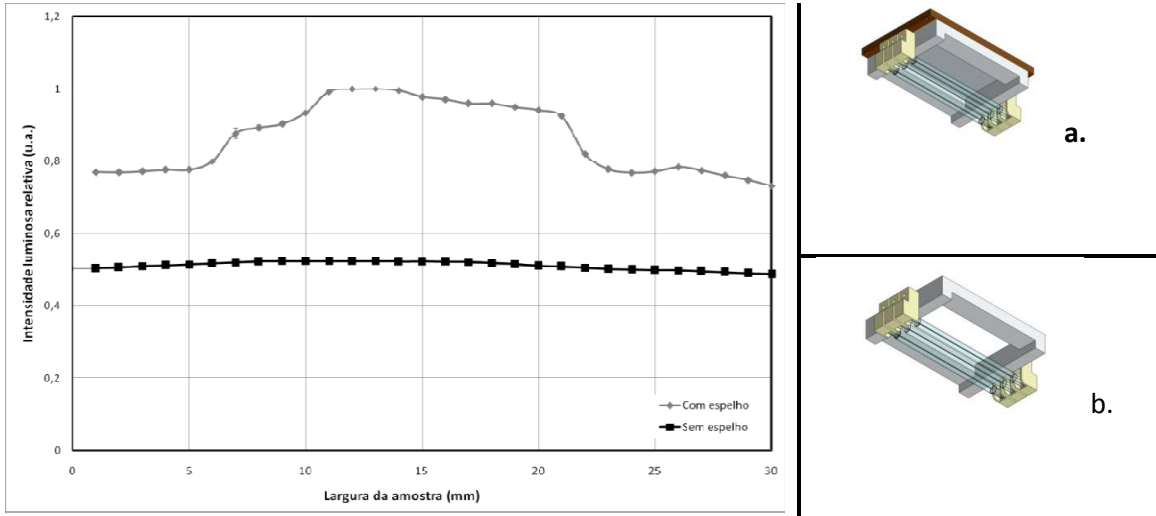


Imagem 4.14 – Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração das três lâmpadas, nos casos: a - com espelho, b - sem espelho.

Em ambas as configurações de iluminação verificou-se a importância do efeito do espelho plano na definição do perfil de intensidade luminosa. Tal como esperado a existência do espelho provoca um aumento significativo da intensidade da radiação na amostra. Este aumento foi de cerca de 100%, nos máximos registados. Na geometria sem espelho embora as intensidades atingidas tenham sido inferiores, a uniformidade do perfil de intensidade foi assegurada. O mesmo já não se verificou quando se introduziu o espelho plano. No caso da lâmpada central, como verificado na análise anterior, observou-se que nas extremidades os níveis de intensidade são superiores, tal como na zona central na configuração das três lâmpadas. A alteração dos perfis de intensidade luminosa podem dever-se pelo menos a duas diferentes razões: a radiação já reflectida no espelho e que sofre uma segunda reflexão nas faces laterais interiores da moldura de alumínio (que embora tenha uma superfície não polida, tem reflectividade suficiente para criar este efeito), promovendo o aumento de intensidade em determinadas zonas da amostra; ou por efeito refractivo do invólucro de quartzo do filamento das lâmpadas.

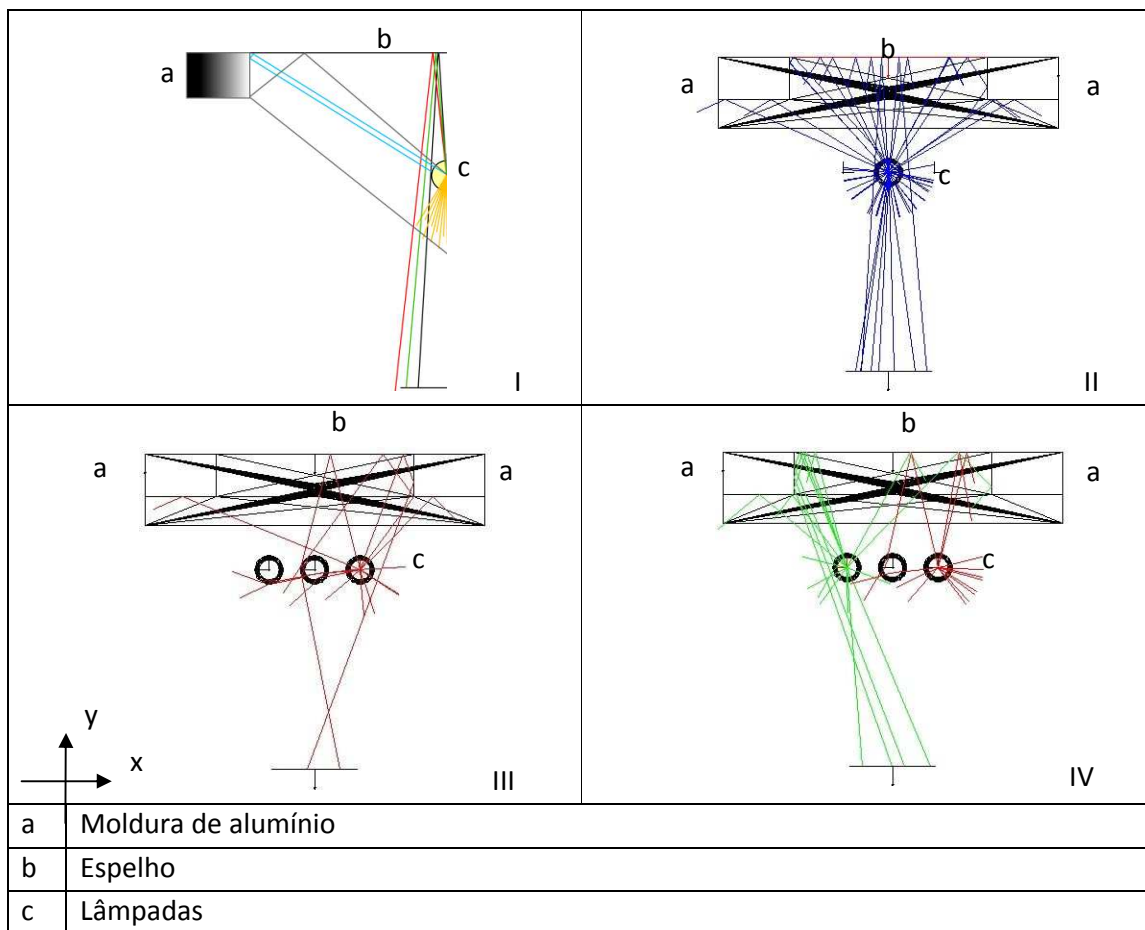


Imagem 4.15 – Diagramas de raios relativos à secção transversal do sistema óptico. OS diagramas II, III e IV correspondem a resultados de simulações *ray-tracing* em ZEMAX.

Na imagem acima mostram-se vários diagramas de raios a partir dos quais se pode concluir que a heterogeneidade dos perfis obtidos quando se impõe o espelho plano se deve tanto à presença das cápsulas de quartzo das lâmpadas como às reflexões na moldura de alumínio. Os diagramas I e II correspondem à situação da lâmpada central e esclarecem de que forma qualquer raio proveniente duma reflexão das faces internas da moldura de alumínio nunca atinge a amostra. Repare-se em I, em que os raios azuis e cinza correspondem às reflexões limite que podem ocorrer na face interna da moldura e nenhum deles é passível de atingir a amostra. Os raios de cor pretos e verde correspondem à gama de radiação emitida com ângulos de amplitude mínima (em relação à vertical, sentido baixo/cima) que já não são obstruídos ou refractados pela cápsula de quartzo e que se concentram nas extremidades da amostra, justificando assim a maior intensidade registada nas extremidades da distribuição medida para esta configuração do sistema. Em II, tem-se uma visão geral destes comportamentos ópticos numa análise com quinze raios gerados aleatoriamente. Os diagramas II e IV, pretendem representar a configuração de iluminação das três lâmpadas. No

primeiro, apenas a lâmpada à direita se encontra activa e verifica-se como a cápsula central pode desempenhar um papel significativo na distribuição da radiação na zona central da amostra, sendo uma fonte difracção da radiação proveniente das outras lâmpadas já reflectida no espelho. Em IV os raios (a verde), emitidos pela lâmpada esquerda, revelam como é que radiação que se reflecte sequencialmente no espelho e depois na moldura de alumínio pode atingir a amostra.

4.2.1.3.3 Contribuição óptica da tampa do reactor

No reactor de CVD a janela de quartzo na tampa superior, através da qual passa a radiação para aquecer a amostra, tem influência na distribuição da intensidade da radiação na amostra. Nesta secção avalia-se o efeito da tampa sem a janela que será depois comparado mais adiante com o caso da tampa com janela.

Lâmpada central

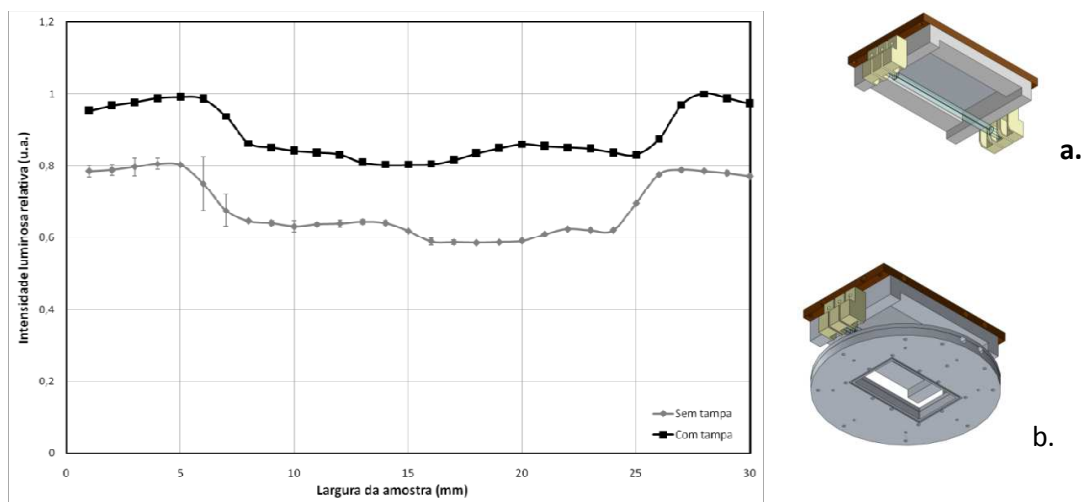


Imagem 4.16 – Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de uma lâmpada central, para os casos: a – sem tampa do reactor, b – com tampa do reactor.

Três lâmpadas

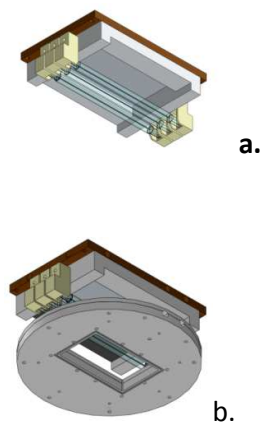
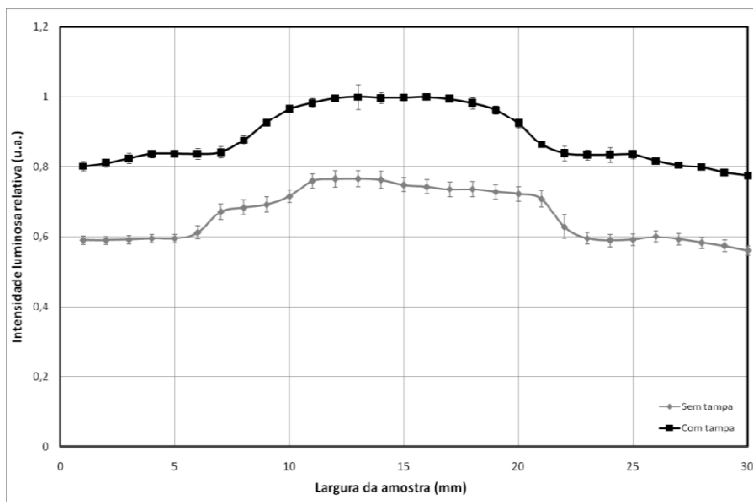


Imagem 4.17 – Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração das três lâmpadas para os casos: a – sem tampa do reactor, b – com tampa do reactor.

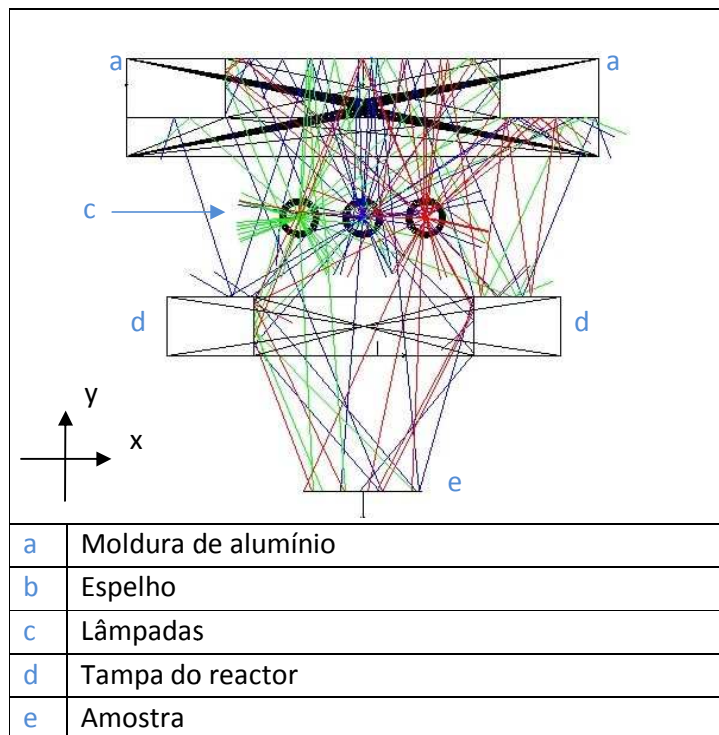


Imagem 4.18 Diagrama de raios relativos à secção transversal do sistema óptico, obtido por simulação *ray-tracing* em ZEMAX.

Contrariamente ao que se poderia esperar, a introdução da tampa do reactor tem como resultado o aumento da intensidade da radiação ao nível da amostra.

Em primeira análise é notório que ao introduzir o elemento tampa do reactor, a intensidade luminosa relativa aumentou consideravelmente, por volta dos 25%, em ambos os casos. Quanto aos perfis, pode-se dizer de grosso modo que estes se conservaram, no entanto, ocorreram pequenas variações de intensidade ao longo das zonas centrais em ambas as configurações. O diagrama de raios da Imagem 4.18 sugere de que forma as superfícies internas da janela da tampa do reactor funcionam como espelhos planos que permitem reflectir radiação, directa das lâmpadas ou proveniente de outras reflexões, ao longo de toda a amostra. A altura das faces internas da janela do reactor é suficiente para que a radiação que nela se reflecta promova um varrimento quase uniforme (ex. dos raios verdes da lâmpada à esquerda) ao longo da amostra, resultando no aumento da intensidade sem alterações significativas nos perfis.

4.2.1.3.4 Influência da reflectividade dos componentes de alumínio

No caso da moldura

Uma lâmpada

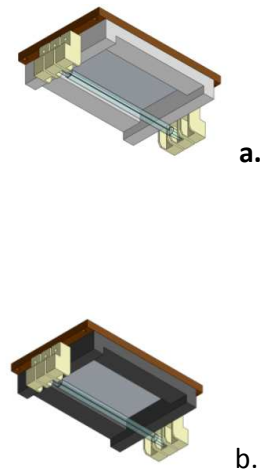
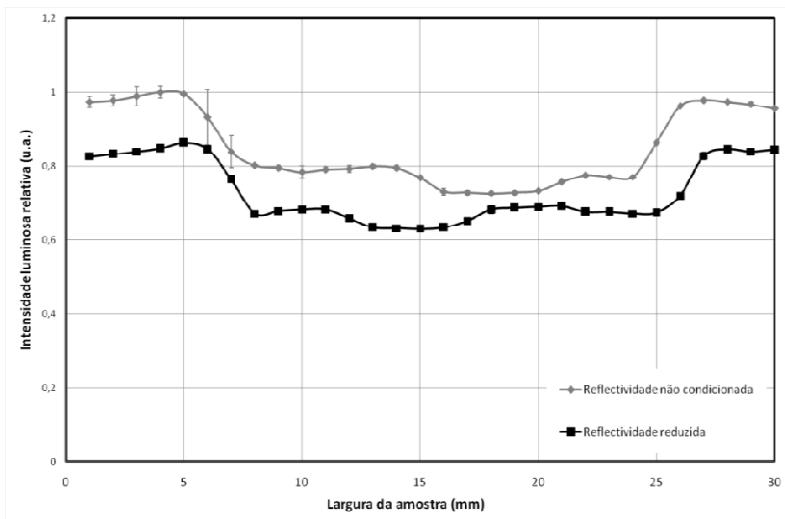
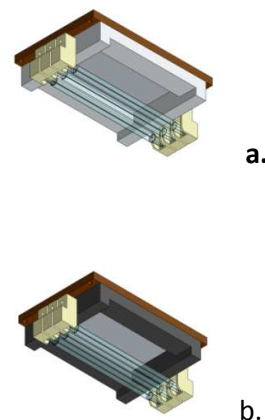
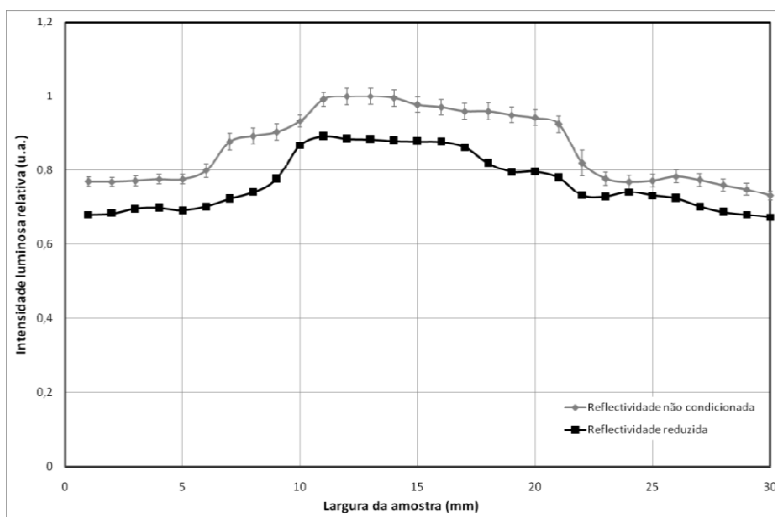


Imagem 4.19 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de uma lâmpada central, para os casos: a – Sem condicionamento da reflectividade da moldura de alumínio, b – reflectividade da moldura de alumínio reduzida.

Três lâmpadas



4.20 – Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração das três lâmpadas, para os casos: a – Sem condicionamento da reflectividade da moldura de alumínio, b – reflectividade da moldura de alumínio reduzida.

Estas medições tiveram como principal objectivo verificar até que ponto a reflectividade das superfícies de alumínio contribuem para o nível de intensidade de radiação recebida na amostra. Na configuração com apenas a lâmpada central verifica-se que ao reduzir a reflectividade da moldura os níveis de intensidade baixaram embora, e como se esperava, não ocorreram variações significativas no perfil. O resultado evidencia que embora a moldura de alumínio não tenha influência na definição do perfil de intensidade, a sua natureza não polida torna-a numa fonte de dispersão de radiação.

No caso das três lâmpadas, o carácter reflector da moldura é sem dúvida de maior relevância uma vez que intervém na forma como a radiação é distribuída ao longo da amostra. Com a redução do índice de reflectividade, o patamar de maior intensidade torna-se mais estreito uma vez que a sua extensão era definida pelo reforço de radiação proveniente da reflexão nas faces internas da moldura. À semelhança do que se verificou na configuração de lâmpadas anterior, a intensidade global ao longo do perfil também foi reduzida, como consequência do carácter dispersivo do alumínio não polido.

No caso da tampa do reactor

Sem janela de quartzo

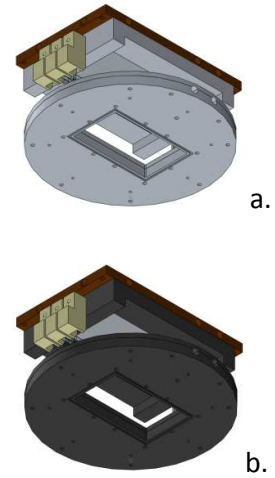
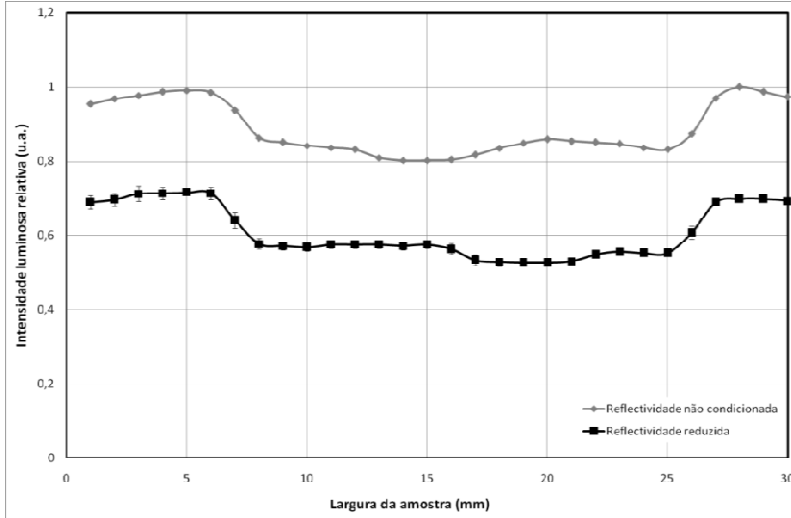


Imagem 4.21 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de uma lâmpada central, para os casos: a – sem condicionamento da reflectividade da moldura do espelho e tampa do reactor, b – reflectividade da moldura do espelho e tampa do reactor reduzida.

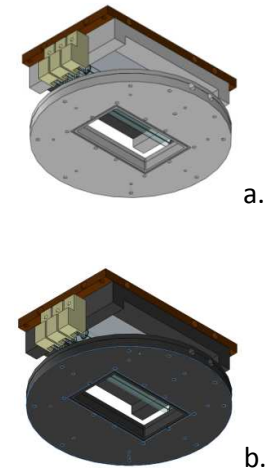
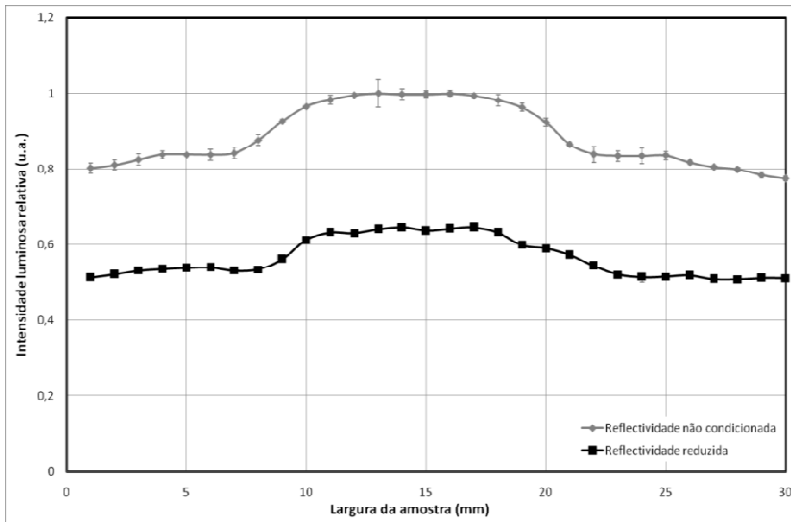


Imagem 4.22 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração das três lâmpadas, para os casos: a – sem condicionamento da reflectividade da moldura do espelho e tampa do reactor, b – reflectividade da moldura do espelho e tampa do reactor reduzida.

A redução da reflectividade dos componentes de alumínio nesta configuração geométrica e de iluminação não trazem novidades à interpretação do comportamento óptico do sistema de iluminação. Os efeitos sobre os perfis de intensidade são idênticos aos já verificados na análise anterior. Os valores de intensidade chegam a diminuir entre os 50% e 60% no caso de maior importância, na configuração das três lâmpadas. Facto que reforça a importância da tampa do reactor para os níveis de intensidade da radiação que incide na amostra.

4.2.1.3.5 Influência da janela de quartzo

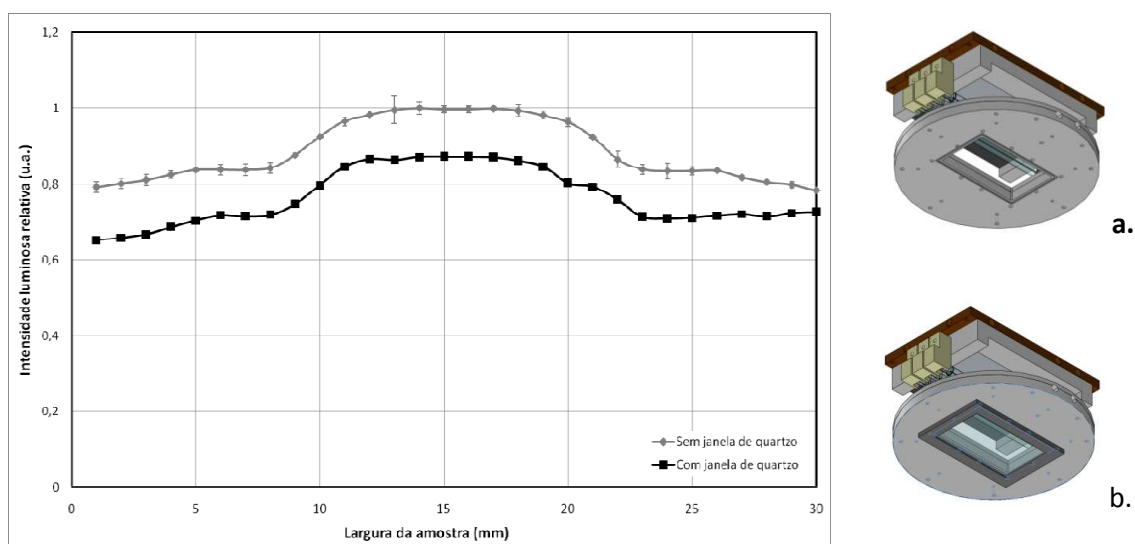


Imagem 4.23 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração das três lâmpadas, para os casos: a – sem janela de quartzo, b – com janela de quartzo.

Por último analisou-se o efeito da presença da lâmina de faces paralelas que constitui a janela de quartzo. Com este componente introduzido a geometria do sistema corresponde à que está presente no reactor SDS. O quartzo tem o seu pico de absorção na radiação infravermelha que corresponde àquela predominante neste tipo de lâmpadas pelo que seria de esperar uma absorção significativa. Efectivamente verificou-se a redução dos níveis de intensidade, e m cerca de 23%, ao longo de toda a distribuição sem que ocorressem alterações significativas nesta.

4.2.1.3.6 Mapa global da distribuição de intensidade luminosa

Os resultados das medições da intensidade luminosa ao longo de uma área igual à de uma amostra (30 mm x 60 mm) permitiram conhecer como é que a radiação se distribui ao longo de toda a área e de modo a poder correlacionar com as zonas da amostra que estarão sujeitas a maiores taxas de transferência de calor por radiação. Abaixo, encontram-se os resultados destas medições.

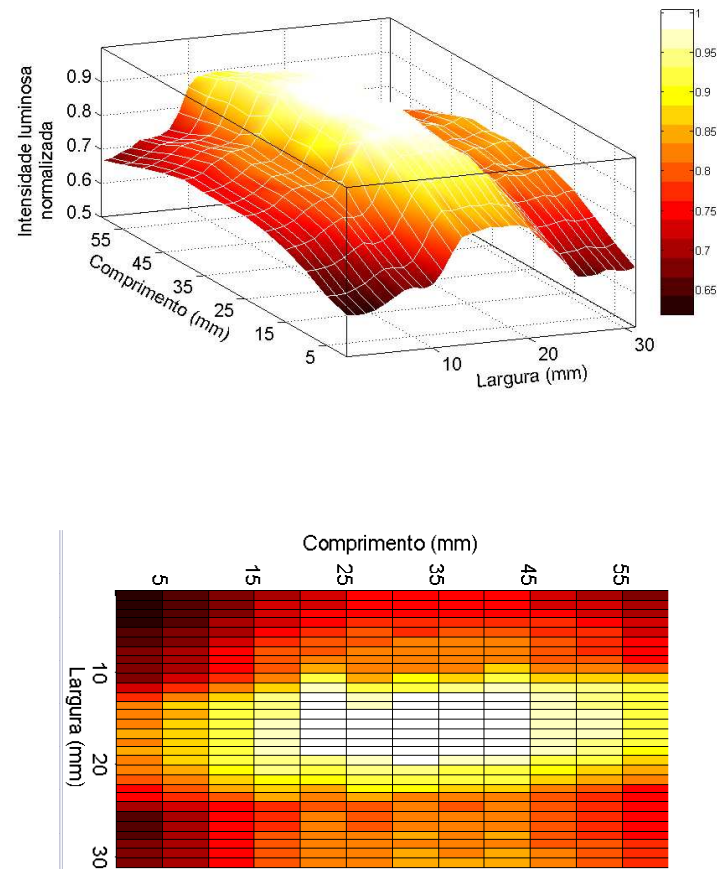


Imagem 4.24 Mapas da distribuição da intensidade luminosa ao longo da área da amostra. Vista isométrica, em cima, e mapa bidimensional, em baixo.

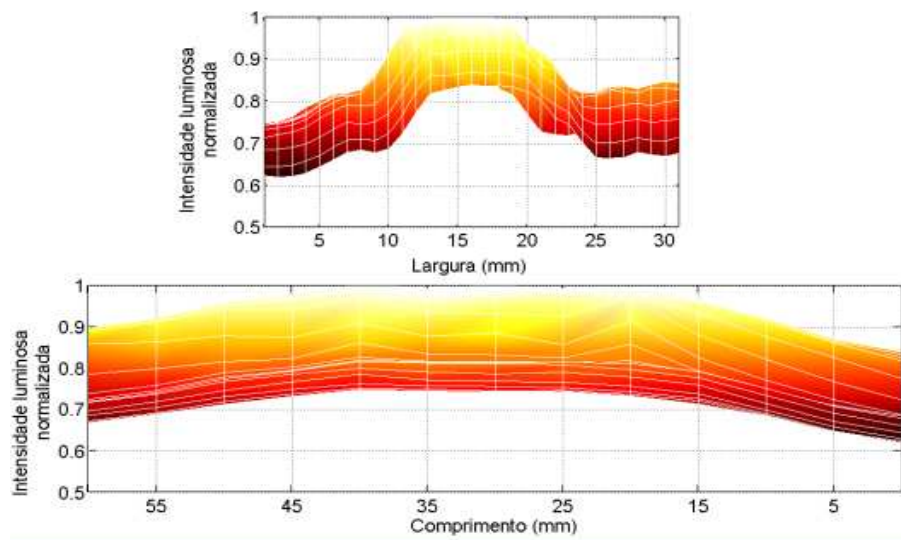


Imagem 4.25 Mapas da distribuição da intensidade luminosa ao longo da área da amostra. Vista transversal, em cima, e longitudinal, em baixo.

Observando os gráficos anteriores, verifica-se que o perfil transversal se mantém semelhante ao longo de todo o comprimento, embora os níveis de intensidade diminuam gradualmente à medida que se afasta do centro para os extremos longitudinais. Este efeito encontra-se descrito analiticamente na secção 5.3.1.1, da qual se transpôs o gráfico da Imagem 4.26 que corresponde ao perfil teórico obtido para a distribuição da intensidade de radiação recebida ao longo de 140 mm a partir de um filamento cilíndrico de 100 mm a uma distância arbitrária. No entanto, como se observa no gráfico da Imagem 4.25 a distribuição da radiação longitudinalmente não é simétrica em relação ao centro, numa das extremidades os valores de intensidade são ligeiramente inferiores, o que pode estar relacionado com efeitos de reflexões nos componentes de alumínio (moldura e tampa do reactor) de modo análogo ao que se verificou segundo na direcção perpendicular.

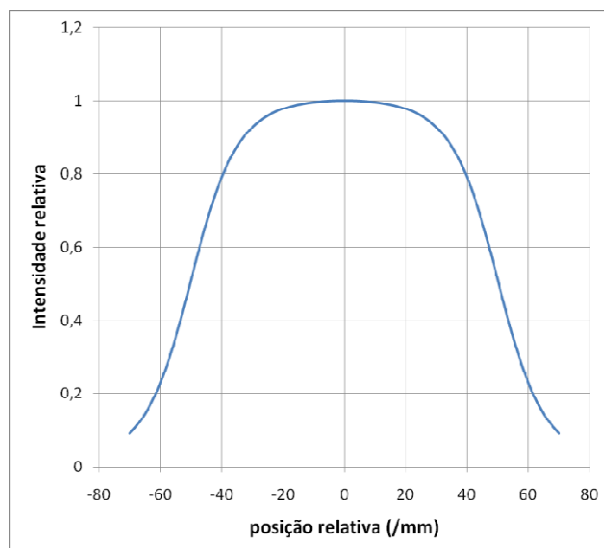


Imagem 4.26 Intensidade relativa de radiação ao longo da direcção de maior comprimento do filamento. O filamento encontra-se entre os pontos -50 e 50 das abcissas.

A nível global aponta-se para o facto de a geometria de todo o sistema óptico promover a existência de uma região central evidentemente mais intensa. Esta característica na distribuição da radiação na amostra está na base da dinâmica do gás no interior do reactor e tem repercussões drásticas nos perfis de deposição de silício ao longo do substrato. Mais tarde, dar-se-á a devida relevância a estes dados quando cruzados com dados experimentais das deposições CVD feitas no reactor SDS.

4.2.2 Simulação da distribuição da radiação

Esta secção tem como principal objectivo validar o uso do software de simulação *ray tracing*, *ZEMAX*, em projectos que exigem dimensionamento de sistemas ópticos não sequenciais. Reproduziu-se o sistema óptico do reactor CVD *SDS* de 1ª geração no programa de simulação e executaram-se algumas experiências idênticas às apresentadas na secção anterior de modo a comparar os resultados do cálculo com os medidos experimentalmente.

As estruturas incluídas na simulação foram:

- Os três filamentos das lâmpadas;
- Invólucros de quartzo;
- Moldura de alumínio de suporte do espelho;
- Espelho;
- Tampa do reactor;
- Janela de quartzo
- Fita (amostra).

Os filamentos das lâmpadas foram representados por uma existente na biblioteca de do *ZEMAX*. De modo a facilitar as simulações, negligenciou-se o diâmetro e o número de voltas que o enrolamento do filamento. Os filamentos das lâmpadas reais não são exactamente lineares apresentam sucessivos arcos de pequenas e diferentes curvaturas o que não acontece com o objecto virtual, facto que pode estar na base na discordância nos perfis de distribuição de radiação observados nas simulações.

As estruturas que envolvem os filamentos foram definidas como formas tubulares de diâmetro e espessura idênticos ao reais (diâmetro = 10 mm e espessura = 1 mm) e com propriedades ópticas do quartzo.

Os elementos sólidos, moldura e tampa do reactor, foram desenhados em *Solidworks* e posteriormente exportados para *ZEMAX*. Estes componentes foram definidos como objectos reflectores por atribuição de um revestimento de alumínio com um índice de reflectividade de 0,70, inferior ao do alumínio polido (0,80).

Quanto ao espelho, foi-lhe atribuído um índice de reflexão igual a 1 para todo o espectro electromagnético, uma vez que o material usado na realidade não estava disponível nas bibliotecas de materiais, o que não constituiu um problema já que o índice de reflexão é muito próximo de 1 para a zona de interesse do espectro.

A janela de quartzo foi representada por um paralelepípedo com as mesmas dimensões da real e foram-lhe atribuídas as propriedades ópticas do quartzo.

A amostra foi representada por um rectângulo de área idêntica e caracterizado como absorvedor óptico ideal (coeficiente de absorção óptica igual a 1). Neste caso, desprezar o coeficiente de reflexão do pó de silício não constitui um problema uma vez que apenas se pre-

tende analisar os perfis de distribuição da radiação na área da amostra e não a taxa efectiva de energia recebida.

As seguintes imagens, correspondem ao *output* gráfico do sistema óptico utilizado nas simulações:

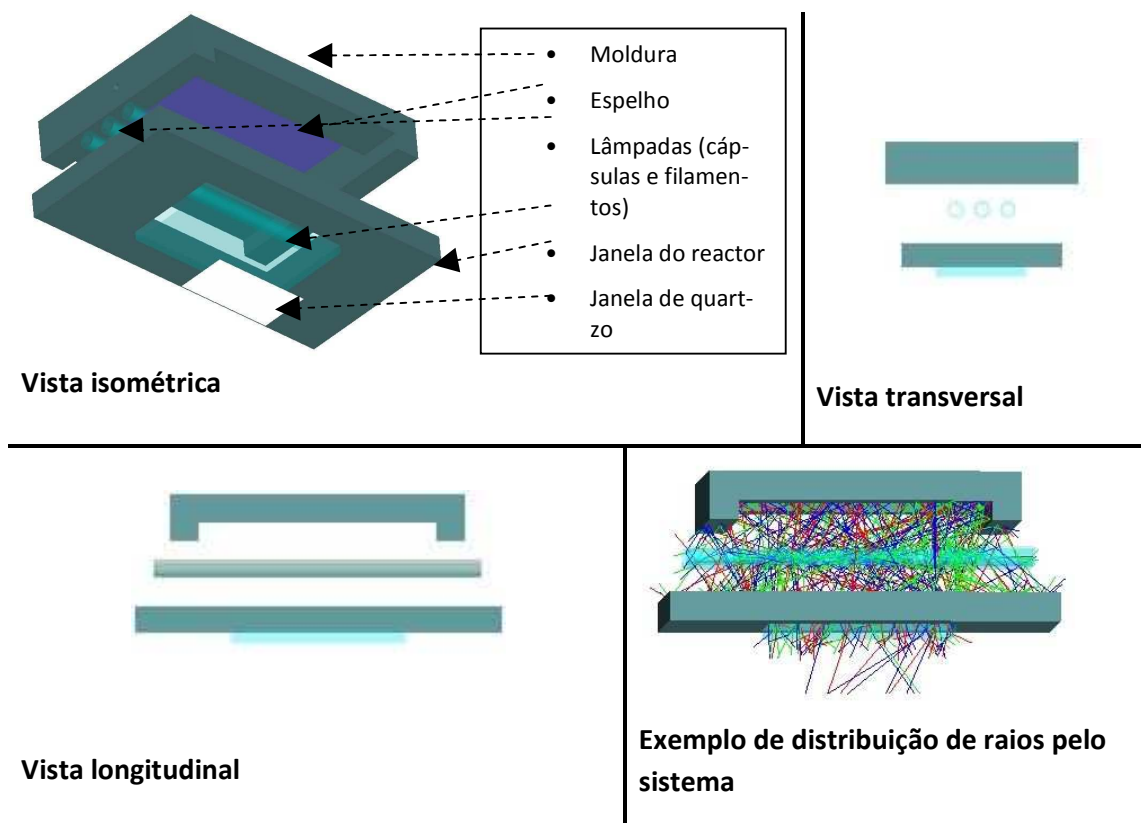


Imagem 4.27 Estrutura do sistema óptico de aquecimento do reactor SDS de 1ª geração utilizadas nas simulações de ray-tracing.

Seleccionaram-se três das configurações apresentadas na secção anterior para proceder ao estudo comparativo com as simulações de *ray tracing*:

1. Moldura de alumínio, espelho plano e lâmpada central;
2. Moldura de alumínio, espelho plano e as três lâmpadas;
3. e 4. Moldura de alumínio, espelho plano, tampa do reactor (com janela de quartzo) e três lâmpadas.

4.2.2.1 Resultados

1. e 2.

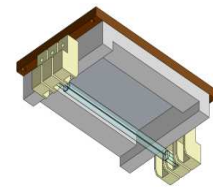
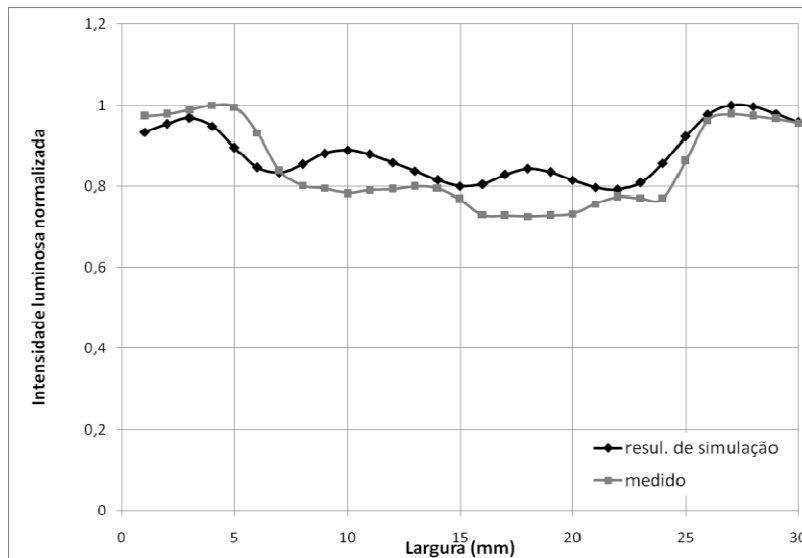


Imagem 4.28 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de uma lâmpada na presença da moldura de alumínio e o espelho. Valores medidos experimentalmente a cinzento e obtidos por simulação a preto

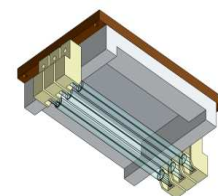
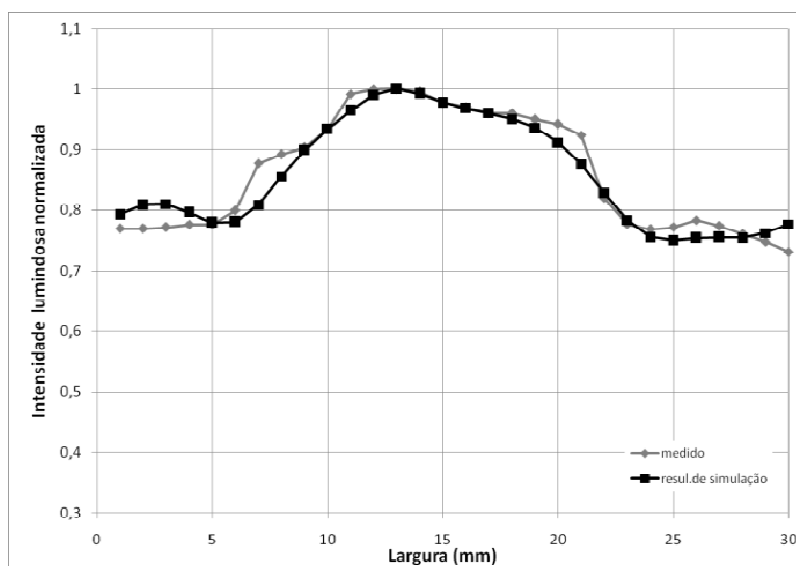


Imagem 4.29 Perfis de intensidade luminosa relativa obtidos com a configuração de três lâmpadas na presença da moldura de alumínio e o espelho. Valores medidos experimentalmente, a cinzento, e por simulação, a preto.

3.

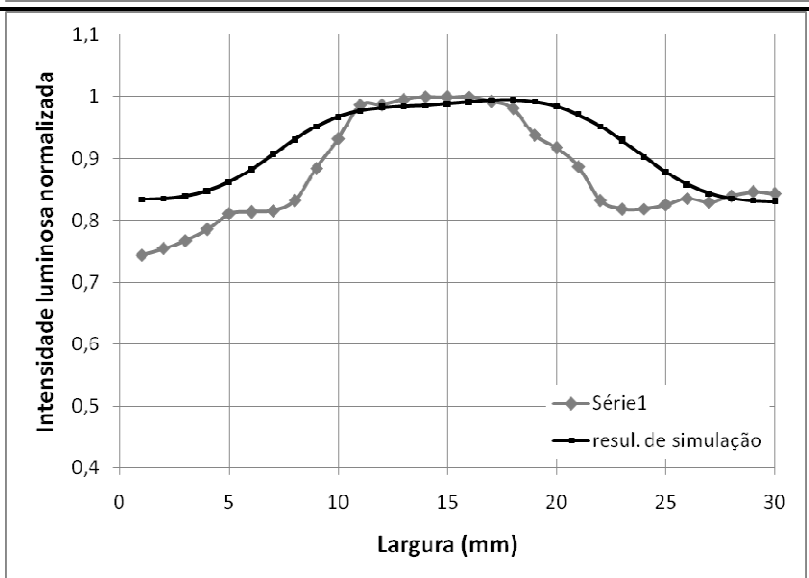
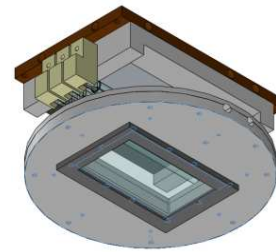
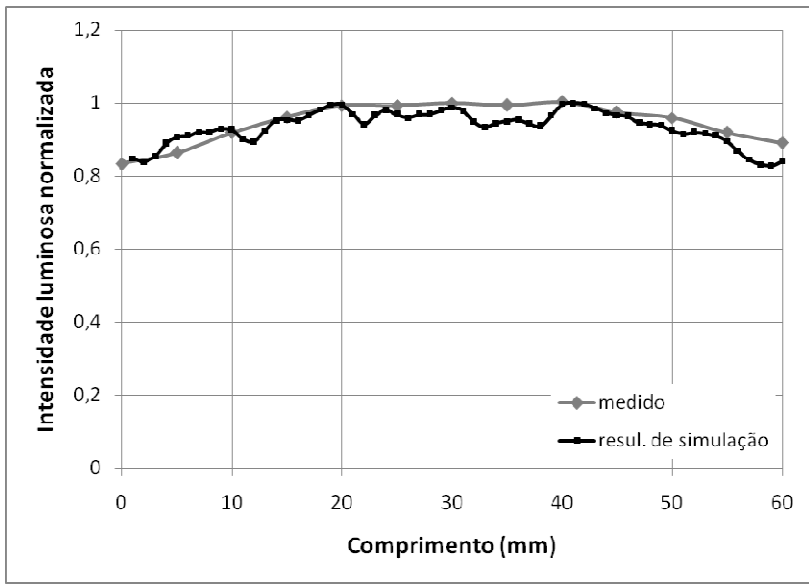
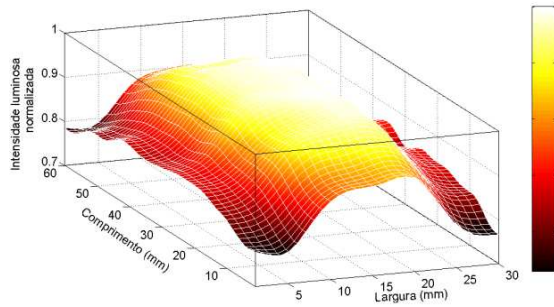
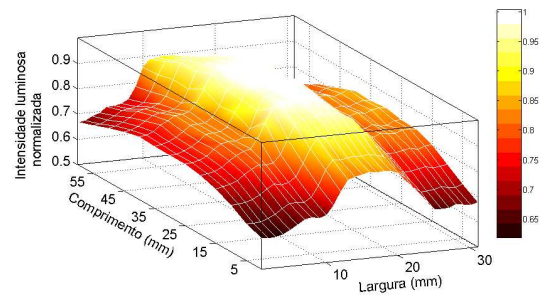


Imagem 4.30 Perfis de intensidade luminosa relativa obtida com a configuração de três lâmpadas na presença da moldura de alumínio, o espelho e tampa do reator com janela de quartzo. Valores medidos experimentalmente, a cinzento, e por simulação, a preto. (Perfil longitudinal, em cima, e perfil transversal, em baixo)

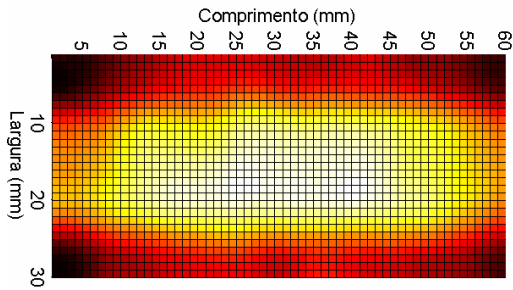
4.



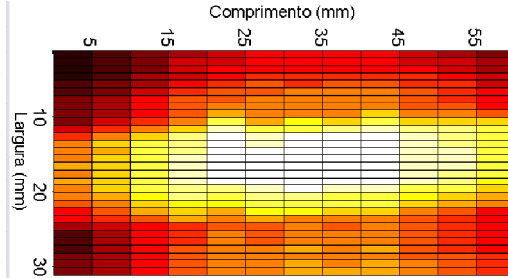
a.



c.



b.



d.

Imagem 4.31 Mapas da distribuição da intensidade luminosa ao longo da área da amostra. Vistas isométricas, em cima, e mapas bidimensional, em baixo. À esquerda figuram os resultados da simulação e à direita os medidos experimentalmente.

Os resultados apresentados, apesar de não convergirem perfeitamente para os reais, mostraram-se bastante satisfatórios. A maior discrepância observada entre os resultados são as variações de pequena magnitude. Na base destas diferenças podem estar inúmeras causas, tais como: a correspondência exacta de geometrias, a limitação do número de raios luminosos usados na simulação, diferença na amostragem entre os dois métodos (superior na simulação), parametrização qualitativa e quantitativa das propriedades ópticas dos materiais. Contudo a nível geométrico aponta-se como principal fonte de erro, a compatibilidade entre os filamentos que no modelo computacional são unidimensionais e em oposição, as lâmpadas reais possuem os filamentos de espirais cilíndricas entremeados por nodos de baixa emitância (a cada $\sim 2\text{cm}$ de filamento). O semelhante sucede-se em relação aos invólucros

de quartzo, que durante a experiência sofrem dilatações térmicas que a curto prazo se reflectem em deformações da sua própria estrutura enquanto no modelo não se prevêm tais deformações. Note-se que na zona de central do primeiro perfil apresentado estes factores de incompatibilidade geométrica se mostram evidentes, as oscilações da intensidade luminosa provocadas pela presença da cápsula de quartzo estão melhor definidas no resultado da simulação do que nas medições experimentais em que a regularidade geométrica não está assegurada.

Quando a falhas associadas a uma má parametrização óptica dos componentes envolvidos verificou-se que a simples atribuição de um índice de reflexão não é suficiente para obter correspondência de resultados quando, por exemplo estes dependem do carácter dispersivo de superfícies rugosas (não polidas), tal como se constata no perfil transversal de intensidade apresentado no ponto 3 e no próprio mapa da distribuição total ao longo da amostra. Em ambas, o estreitamento do patamar central sugere a má opção por superfícies idealmente polidas e reflectoras.

A amostragem de resultados é um outro problema que se encontra neste tipo de tipo de simulação. A selecção do número de raios recrutados para emissão nos filamentos é extremamente limitada pelos recursos computacionais disponíveis. Nas experiências levadas a cabo atribui-se à emissão de cada filamento, 5×10^6 raios que durante o cálculo foram emitidos mesmo número por unidade de comprimento mas direcções aleatórias, o que não garante a mesma densidade de radiação emitida em todas as direcções. No perfil longitudinal do ponto 3, o ruído de baixa magnitude evidencia a necessidade de aumento do número de acontecimentos na superfície alvo.

Não obstante das diferenças observadas entre os resultados computacionais e as medições reais, este tipo de software mostrou-se ser uma ferramenta útil para a caracterização de sistemas ópticos já existentes. Caso exista rigor na parametrização do modelo, o *ZEMAX* torna-se numa ferramenta muito útil em caracterização substituindo a necessidade de executar medições experimentais muitas vezes dispendiosas, morosas e sujeitas a erros experimentais, principalmente quando o objectivo é obter mapeamentos com boas resoluções.

4.2.3 Transferência de calor por radiação

4.2.3.1 Medidas da potência óptica na amostra

A medida experimental da conversão da potência eléctrica fornecida ao sistema das lâmpadas em potência radiada opticamente, é muito útil já que a primeira é facilmente medível usando simples multímetros e pode ser usada como um parâmetro de operação do forno. Para além disso uma estimativa teórica é demasiado complexa uma vez que depende de factores como a geometria do próprio sistema óptico, o conhecimento rigoroso da temperatura dos filamentos das lâmpadas etc.

4.2.3.1.1 Análise do problema

Num corpo exposto à radiação do sistema de iluminação o seu comportamento térmico dependerá da combinação dos três modos de troca de calor presentes: troca de calor por condução térmica, por convecção e por radiação. A temperatura na amostra será solução da seguinte equação diferencial [11]:

$$Q_{rad} - Q_{conv} - Q_{cond} = \rho V c \frac{dT}{dt} \quad (4.1)$$

Em que V corresponde ao volume do corpo, ρ à densidade volúmica, c ao calor específico, T à temperatura e t ao tempo.

Neste caso, a potência óptica pode ser conhecida através de dT/dt se o sistema depender apenas de q_{rad} , isto é, se os outros fluxos de calor forem desprezáveis ou se forem bem conhecidos.

Para determinar dT/dt , optou-se por medir a variação da temperatura num corpo de massa, volume e calor específico bem conhecidos, quando toda a sua área é uniformemente exposta ao mesmo q_{rad} , a partir de uma situação de equilíbrio térmico. A variação inicial da temperatura vai ser dominada pela exposição abrupta à radiação emitida pelas lâmpadas, pois se todos os pontos da superfície forem expostos à mesma quantidade de radiação, a condução térmica e a perda de calor por convecção podem ser desprezados nesses momentos iniciais. Na imagem que se segue mostra-se a evolução temporal da temperatura no sensor.

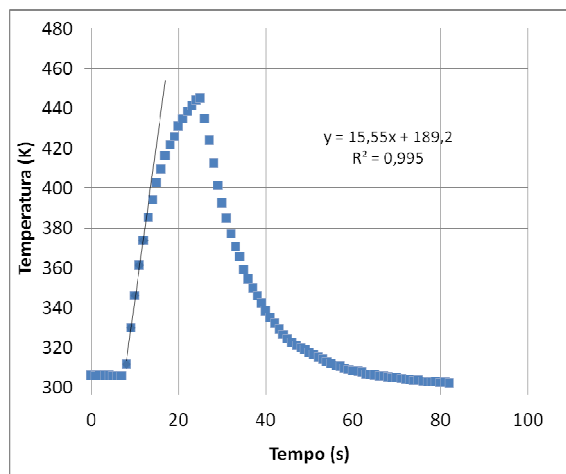


Imagem 4.32 Variação da temperatura em silício multicristalino numa breve exposição à radiação do sistema de lâmpadas seguida da ausência de radiação.

Nos instantes que se seguem à exposição da radiação, a resposta da temperatura é praticamente linear, e o seu declive corresponde a:

$$\rho V c \frac{dT}{dt} \quad \text{ou} \quad mc \frac{dT}{dt}$$

(4.2)

4.2.3.1.2 Montagem e procedimento experimental

Nas experiências efectuadas mediu-se a temperatura através de um bolómetro constituído por um termopar tipo K (*cromel-alumel*) acoplado térmicamente a uma placa quadrada de silício (5 mm x 5 mm x 0.3 mm) através de pasta térmica de alta condutividade térmica (usada tipicamente em sistemas dissipadores de calor). Os fios do termopar foram introduzidos numa vareta de cerâmica que se fixou para que a placa de silício ficasse suspensa, exactamente na posição relativa ao centro da amostra no reactor, conservando também a mesma distância relativa às lâmpadas. A reduzida área da amostra garante que a radiação incidente por unidade de área seja idêntica em toda a superfície, uma vez que a distribuição da radiação na zona central é consideravelmente uniforme, tal como se verificou anteriormente (Imagem 4.31). Devido à dificuldade de montar o sistema dentro do reactor, procedeu-se a uma montagem semelhante à adoptada na caracterização da distribuição da radiação ao longo da área da amostra, em que se utilizaram apenas os elementos que

condicionam a incidência da radiação, a tampa de alumínio e a janela de quartzo. Na imagem seguinte mostra-se o esquema da montagem experimental.

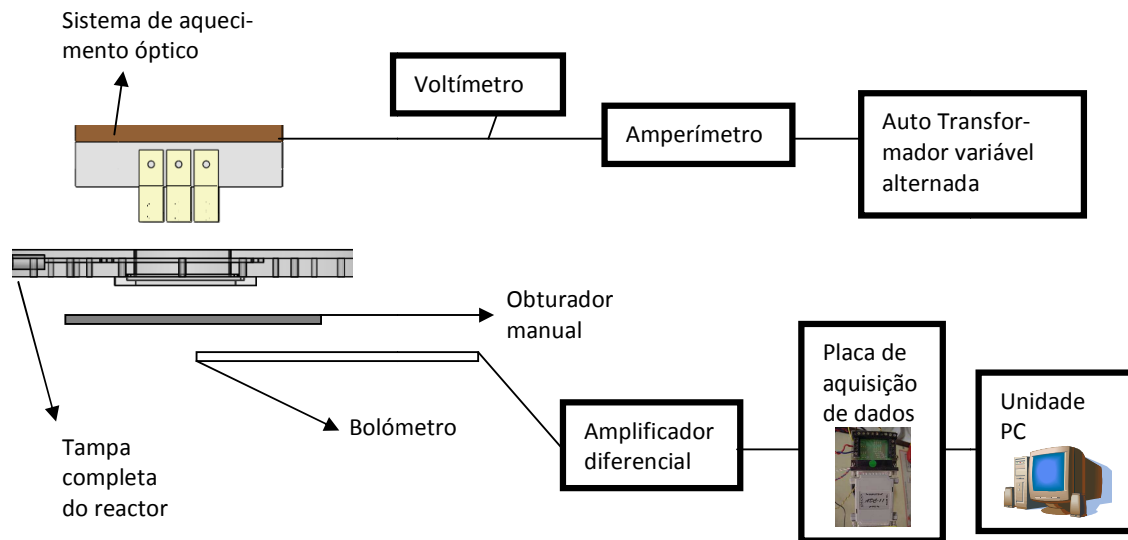


Imagem 4.33 Esquema da montagem experimental para medição da potência óptica do reactor SDS.

O sistema de iluminação foi alimentado por um auto transformador variável (*OFICEL*) até aos 240 VAC, aos terminais do qual foram ligados um voltímetro e um amperímetro que permitiram monitorizar a potência eléctrica injectada no sistema.

Os terminais do termopar foram conectados a um amplificador diferencial, de ganho 150, cuja saída foi monitorizada por uma unidade PC através de um interface de aquisição de dados (*pico technology*, modelo *ADC-11*).

O procedimento baseou-se na medição da temperatura na placa de silício, numa série de sequências de exposição abrupta à radiação, seguida da obstrução da radiação por via de um obturador manual. Este procedimento foi repetido em séries de três para diferentes valores de potencial eléctrica injectada no sistema (correspondentes às tensões 90 V, 110 V, 130 V, 170 V, 190 V, 200 V, 210 V). Antes de se proceder a estas medições, mediu-se a característica I-V das lâmpadas, na gama de potências consideradas para a experiência. Note-se que para garantir que a potência emitida pelas lâmpadas é constante, sempre antes de cada medida, esperou-se cerca de 45-60 minutos. A variação da potência incidente sobre a placa de silício é feita usando um obturador mecânico e não por variação da tensão aplicada às lâmpadas.

4.2.3.1.3 Resultados

4.2.3.1.3.1 Característica I-V

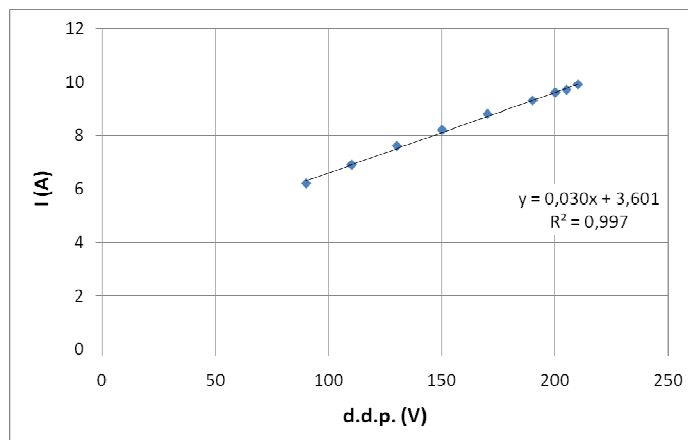


Imagem 4.34 Característica I –V do conjunto de lâmpadas.

Verificou-se que para a gama de potências seleccionadas para a experiência, as lâmpadas apresentaram um comportamento perfeitamente óhmico ($r^2=0.997$).

4.2.3.1.3.2 Potência óptica (dT/dt)

O tipo de resposta obtido para cada valor de potência eléctrica injectada encontra-se exemplificado no seguinte gráfico relativo a uma sequência de abertura e fecho da radiação proveniente do sistema de iluminação do reactor quando aplicada uma tensão de 90 V.

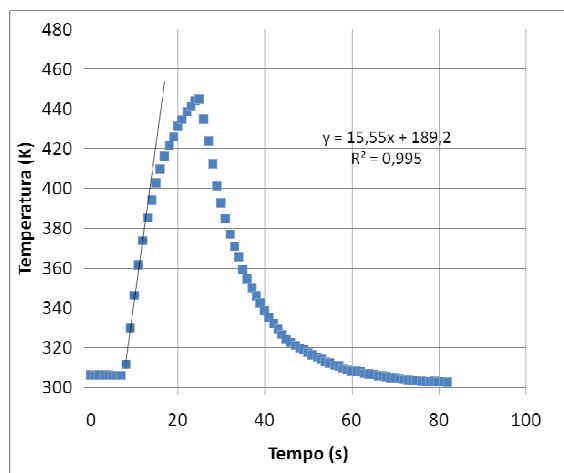


Imagem 4.35 Variação da temperatura em silício multicristalino numa breve exposição à radiação do sistema de lâmpadas seguida da ausência de radiação.

Dos declives das rampas iniciais das respostas obtidas para a gama de potências eléctricas obtidas, traçou-se a variação da potência óptica com a potência eléctrica. O resultado encontra-se no seguinte gráfico.

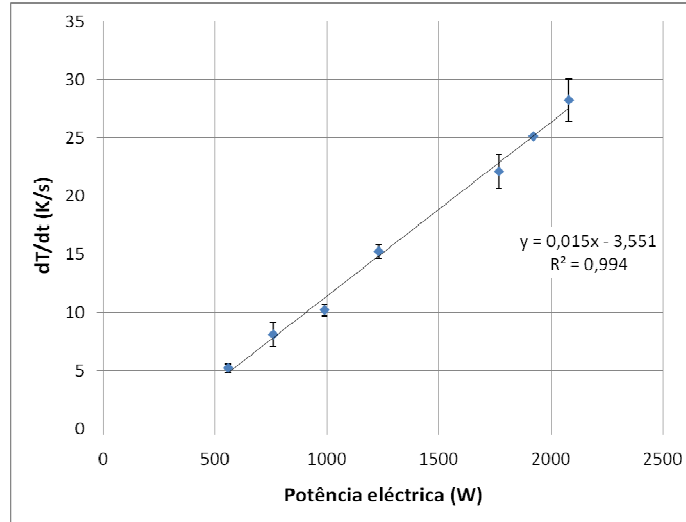


Imagem 4.36 Variação da potência óptica com a potência eléctrica fornecida ao sistema de lâmpadas.

A variação obtida tem um carácter linear e pode ser descrita a partir da regressão linear como:

$$\frac{dT}{dt} = 0,015VI - 3,511$$

(4.3)

4.2.3.1.3.2.1 Distribuição longitudinal e transversal de q_{rad} na amostra

Propriedades da placa de silício do bolómetro:

$$m = 1,81 \times 10^{-5} \text{ Kg}$$

$$\text{Área da superfície (A)} = 2,5 \times 10^{-5} \text{ m}^2$$

$$\text{Calor específico (c)} = 710 \text{ J/kg.K}$$

Calculou-se o fluxo de calor radiativo incidente na placa de silício a partir de:

$$q_{rad} = \frac{\rho V c}{A} \frac{dT}{dt}$$

(4.4)

Considerando que o valor de q_{rad} corresponde ao máximo, uma vez que o bolómetro foi colocado no centro relativo da amostra à mesma distância das lâmpadas, adaptaram-se os perfis, normalizados, transversal e longitudinal da distribuição de intensidade na amostra, a perfis de distribuição de fluxo de transferência de calor por radiação. Para o cálculo de q_{rad}

considerou-se o dT/dt correspondente à aplicação de uma d.d.p aos terminais das lâmpadas de 210V, por ter sido uma tensão utilizada nas deposições das quais resultaram filmes que deram origem a células fotovoltaicas de boa qualidade [7].

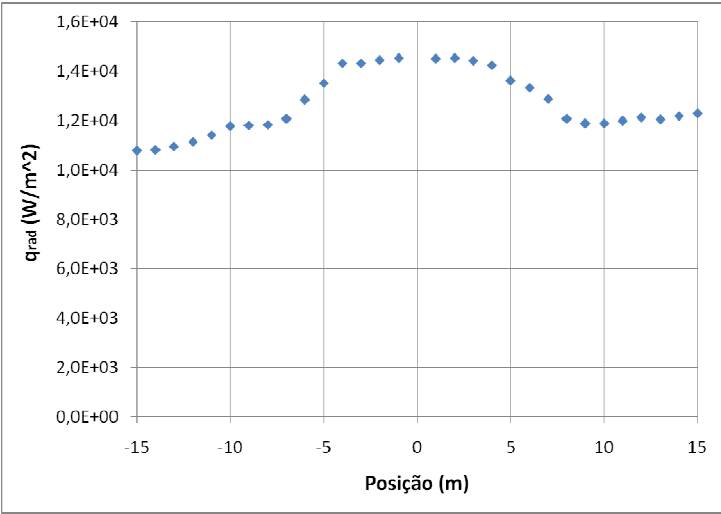


Imagem 4.37 Perfil do fluxo de calor radiativo ao longo das posições correspondentes ao centro transversal da amostra.

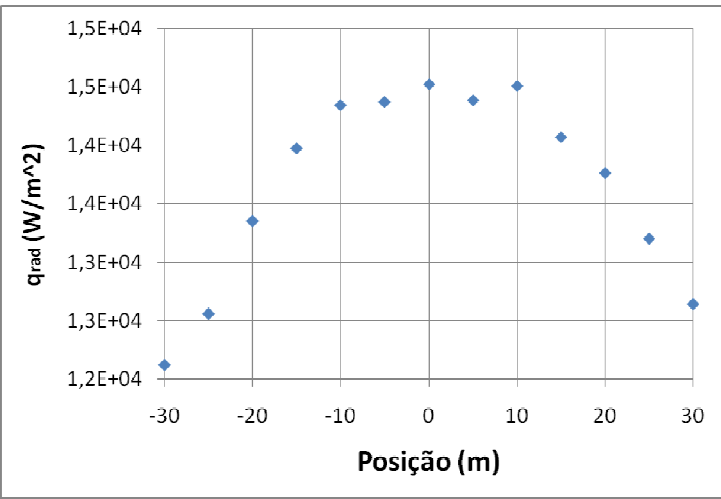


Imagem 4.38 Perfil do fluxo de calor radiativo ao longo das posições correspondentes ao centro longitudinal da amostra.

4.2.4 Transferência de calor por convecção e condução

4.2.4.1 Simulação do fluxo interior no reactor

O objectivo deste estudo consiste em perceber a dinâmica do gás dentro do reactor e de que forma influencia a distribuição da temperatura na amostra. Com as simulações efectuadas não se pretende testar soluções analíticas para a dinâmica de decomposição do silício nem para taxa de deposição de silício.

4.2.4.1.1 Preparação da simulação

Na preparação do modelo para simulação da dinâmica de fluidos e transferência de calor na plataforma *FlowWorks*, foi aproveitada a geometria tridimensional do reactor SDS da Imagem 4.1, concebida no *software SolidWorks*. Tentou aproximar-se as condições da experiência o mais possível das reais, no entanto encontraram-se várias limitações, tanto a nível de parametrização dos materiais e fluidos envolvidos no reactor, como nos processos de transferência de calor envolvidos na técnica de APCVD (CVD a pressão atmosférica) em regimes de baixa temperatura.

4.2.4.1.1.1 Materiais do reactor

Os materiais do reactor são na sua maioria o alumínio e quartzo. Estes materiais constavam da biblioteca do *Flowworks*, pelo que foram atribuídos aos respectivos componentes, após uma validação das propriedades por comparação com outras fontes [11].

Alumínio: Tampas superior e inferior, parede lateral;

Quartzo: Janela da tampa, suporte da amostra e picoleta.

Propriedades termo físicas consideradas nas simulações:

4.2.4.1.1.1.1

Alumínio

Densidade volúmica@300K (ρ) = 2688.9Kg/m³

Tipo de condução térmica: isotrópica

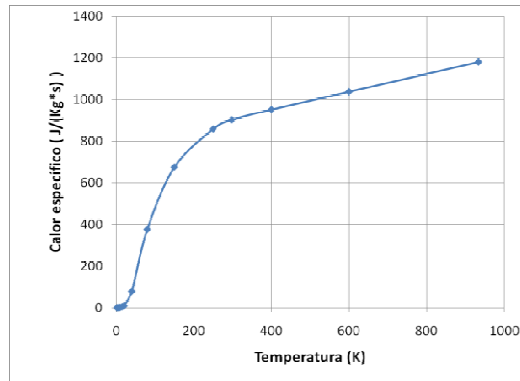


Imagem 4.39 Variação do calor específico a pressão constante com a temperatura para o alumínio.

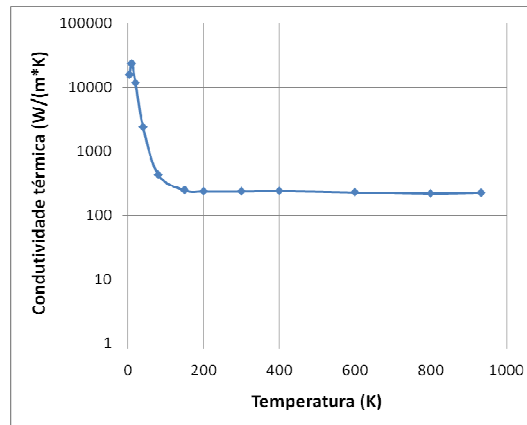


Imagem 4.40 Variação do coeficiente de condutividade térmica do alumínio com a temperatura.

4.2.4.1.1.2 Quartzzo

As propriedades incluídas na biblioteca para este material correspondem ao quartzo fundido, que é geralmente utilizado em aplicações deste género e que tem um coeficiente de expansão térmica ($5.5 \times 10^{-7} \text{ mm } ^\circ\text{C}$).

Densidade volúmica@300K (ρ) = 2220 Kg/m³;

Calor específico a pressão constante @300K (C_p) = 745 J/(Kg*K);

Tipo de condução térmica: isotrópica.

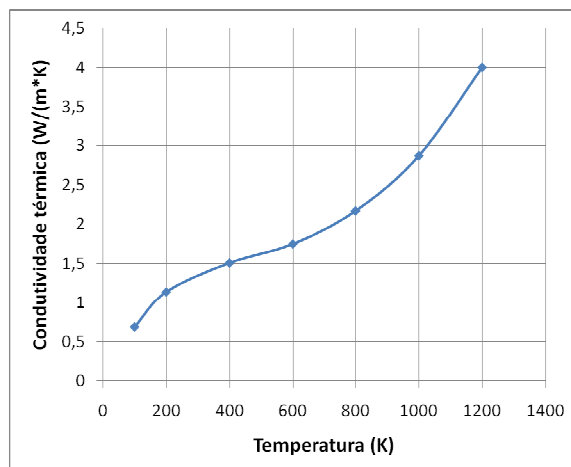


Imagem 4.41 Variação do coeficiente de condutividade térmica do quartzo fundido com a temperatura

4.2.4.1.1.2 Fluido

Na parametrização das propriedades da mistura gasosa ($\text{SiH}_{4(g)}$ (10%) + $\text{H}_{2(g)}$) que constitui o fluido, surgiu pela primeira vez a necessidade de recorrer a uma aproximação. A escassez de informação editada acerca da variação na gama de temperaturas pretendidas de propriedades relevantes do fluido, tais como a viscosidade dinâmica, condutividade térmica e calor específico, juntamente com a inviabilidade da sua medição por limitação de instrumentação e tempo, conduziram à decisão de resumir a composição gasosa ao hidrogénio. O peso desta aproximação é razoável uma vez que o silano representa a menor fracção da mistura gasosa.

Nas simulações, o fluido foi considerado newtoniano e incompressível, pelo que as propriedades incluídas na biblioteca do *FloWorks* foram consideradas suficientes e adequadas para o estudo realizado:

4.2.4.1.1.2.1

Hidrogénio gasoso ($\text{H}_{2(g)}$)

Massa molecular: 0.002016 Kg/mol

C_p/C_v (@300 K) = 1.4035

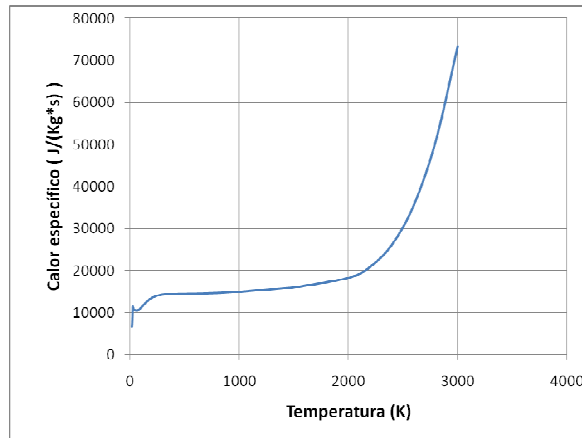


Imagem 4.42 Variação do calor específico do hidrogênio com a temperatura.

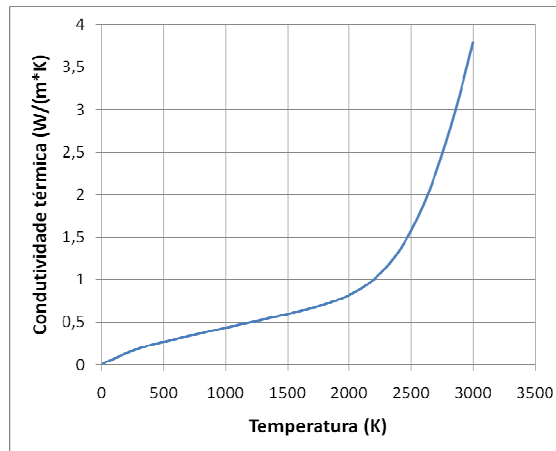


Imagem 4.43 Variação do coeficiente de condutividade térmica do hidrogênio com a temperatura

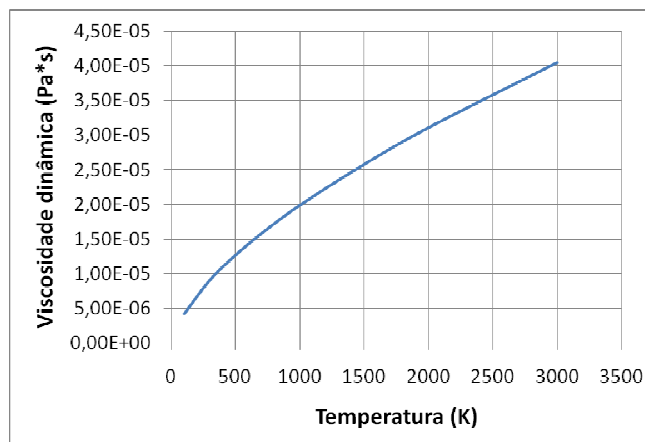


Imagem 4.44 Variação do coeficiente de viscosidade dinâmica (μ) do hidrogênio com a temperatura.

4.2.4.1.1.3 Amostra - Pó de silício

Quanto à parametrização térmica do pó de silício, considerou-se razoável atribuir os coeficientes de condutividade térmica conhecidas para o silício nano poroso [13], que, para densidades idênticas às do nano-pó, correspondem a duas ordens de grandeza abaixo dos do silício cristalino. Para o calor específico, considerou-se o valor do óxido nativo do silício (SiO_2) uma vez que o pó de silício utilizado nas experiências com este reactor CVD estava completamente oxidado.

Na verdade, qualquer estimativa das propriedades térmicas do pó de silício, nas condições de oxidação e compactação idêntica às utilizadas nesta técnica, será sempre demasiado grosseira. Contudo, para o tipo de informação que se pretende retirar destas simulações, a condutividade térmica assume um papel de maior relevância em relação ao calor específico uma vez que se assegura o alcance da temperatura correcta à superfície da amostra.

Densidade volúmica (ρ) = 230 Kg/m^3 [ref]

Calor específico (C_p) = $1000 \text{ J/(Kg}^\circ\text{K)}$

Tipo de condução térmica: isotrópica

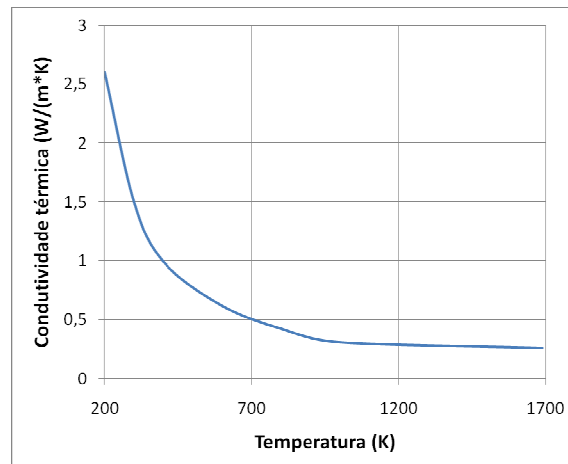


Imagem 4.45 Estimativa da variação da condutividade térmica do pó de silício com a temperatura.

4.2.4.1.2 Simulação

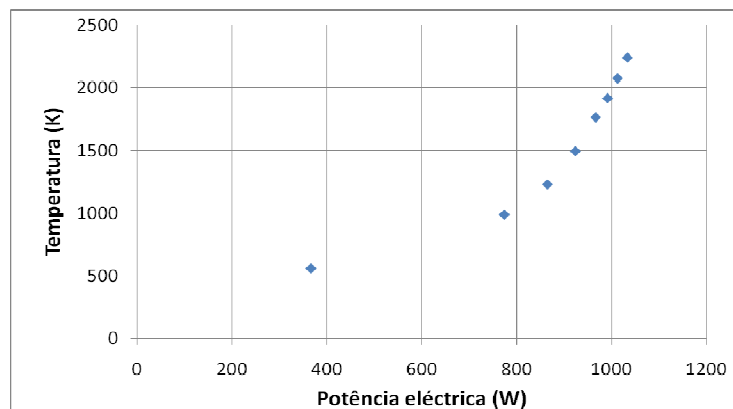
Nas simulações efectuadas, foi negligenciada a troca de calor radiativa entre corpos, pois tal provoca um considerável aumento da complexidade do problema e consequente exigência de elevado poder de processamento computacional. Nas tentativas de simulação

de transferência de calor radiativa verificou-se que, mesmo em casos mais simples, o tempo necessário para alcançar a convergência dos parâmetros pretendidos chegava a ultrapassar uma semana, o que se considerou inviável mediante o tempo disponível. Por tal, nas simulações levadas a cabo considerou-se apenas a condução de calor em sólidos e fluidos, e transferência de calor por convecção.

A maior crítica a ser feita ao modelo de simulação é o facto de não considerarem a cinética da reacção de decomposição do silano, que tem repercussões significativas nos resultados obtidos. Como se pode verificar na equação de pirólise (eq.(1.1)), por cada molécula de silano pirolisada resultam duas de hidrogénio gasoso. Isto significa que à medida que o silano é decomposto ocorre expansão volumica do fluido, o que influenciará os níveis de pressão no reactor e consequentemente toda a dinâmica do fluido.

4.2.4.1.2.1 Condições fronteiras e condições iniciais:

- As paredes e tampa do reactor foram mantidas a 293.15 K.
- Temperatura inicial da janela de quartzo: 393,15 K (temperatura média hipoteticamente alcançada devido à absorção de radiação)
- Temperatura inicial do suporte da amostra e picoleta: 293.15 K
- A superfície da amostra foi sujeita a um fluxo de calor proporcional à distribuição de intensidade da radiação medida experimentalmente (Imagem 4.31), embora o pico máximo corresponda a $6,94 \times 10^4 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ e não aos $1,45 \times 10^4 \text{ W}/(\text{m}^2 \text{ K})$ estimados no capítulo anterior. Com efeito verificou-se que utilizando os valores obtidos experimentalmente para transferência de calor por via radiativa se atingiam apenas valores de temperatura da ordem dos 400 K. Este valor de fluxo de potência foi estimado através de várias simulações idênticas à que se descreve, de modo a obter valores de temperatura no centro da amostra (1023.15 K – 1173.15 K) semelhantes aos atingidos experimentalmente durante o processo CVD cujos resultados se encontram descritos em [7].



Variação da temperatura no centro do substrato do pó com a potência eléctrica fornecida ao sistema de lâmpadas (cortesia de Cláudia R. Pinto).

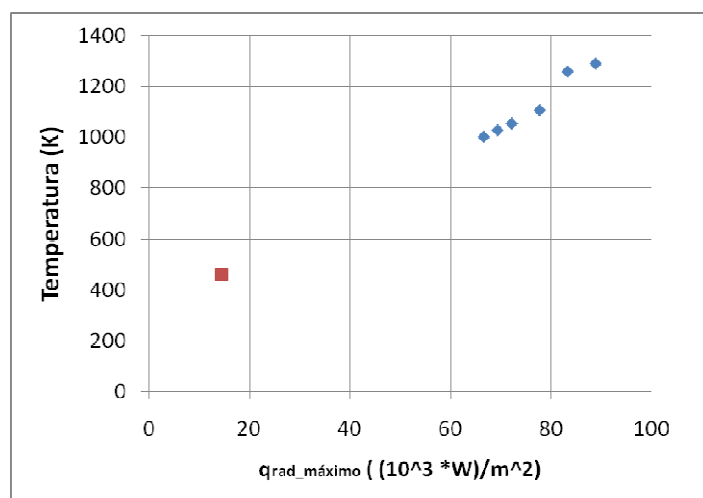


Imagem 4.46 Temperatura obtida para o centro da amostra por simulação para vários valores de fluxo de potência (losangos azuis) e medido experimentalmente (quadrado vermelho).

4.2.4.1.2.2 Resultados

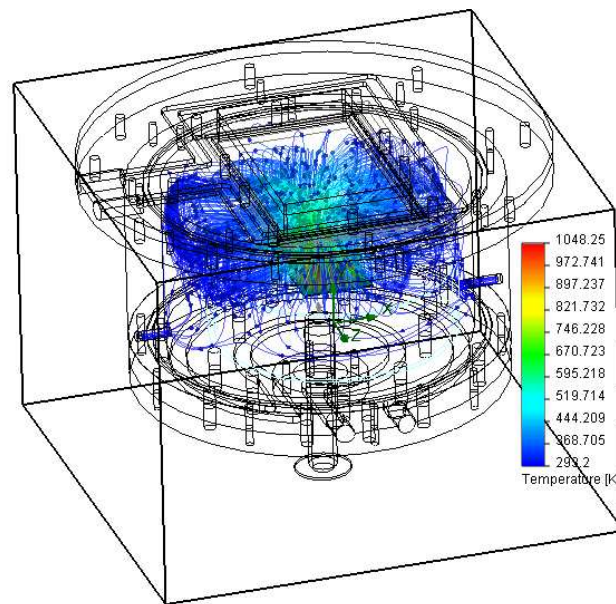


Imagem 4.47 Trajectórias de fluxo (vista isométrica).

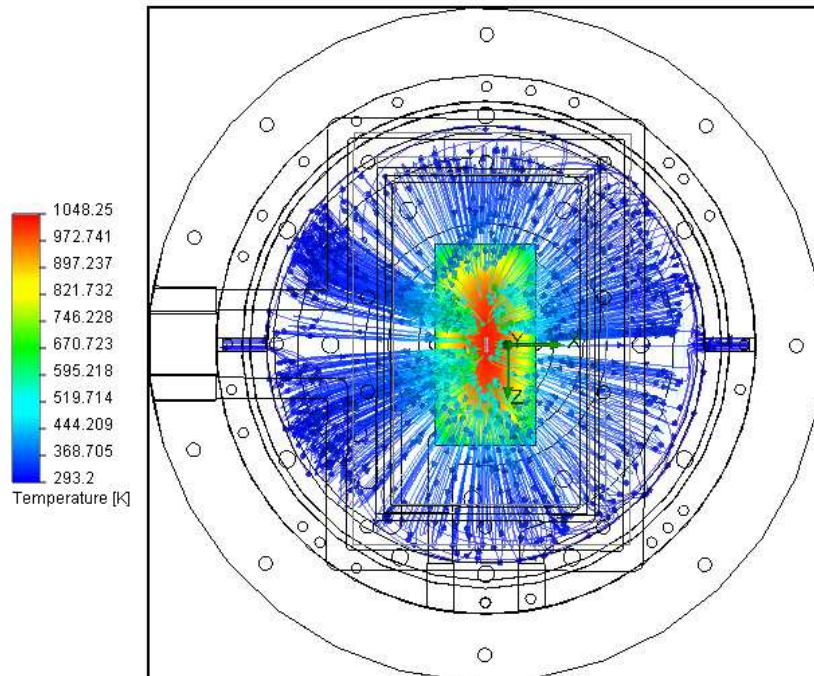


Imagem 4.48 Trajectórias de fluxo em que a entrada do elemento gasoso se encontra do lado direito. (vista de topo)

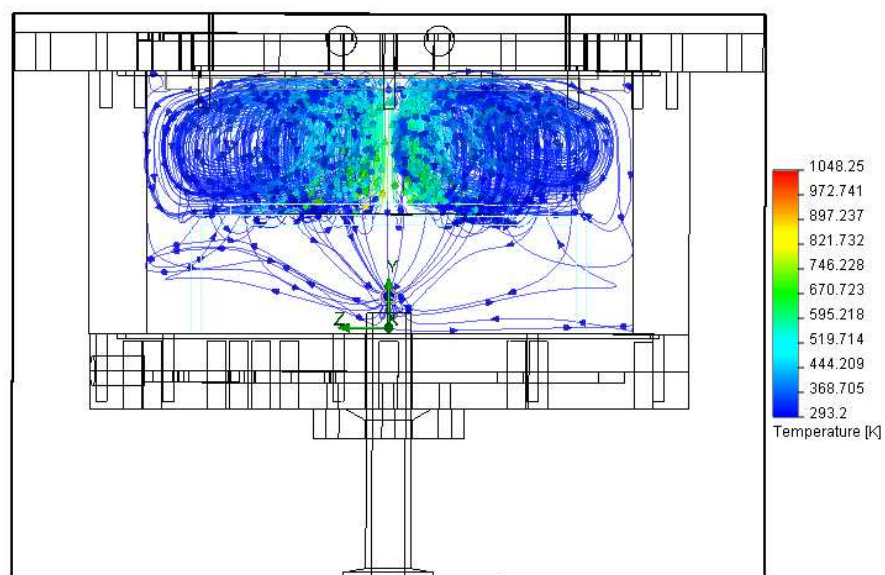


Imagem 4.49 Trajetórias de fluxo vistas a partir do plano da entrada do elemento gasoso. (Vista lateral direita)

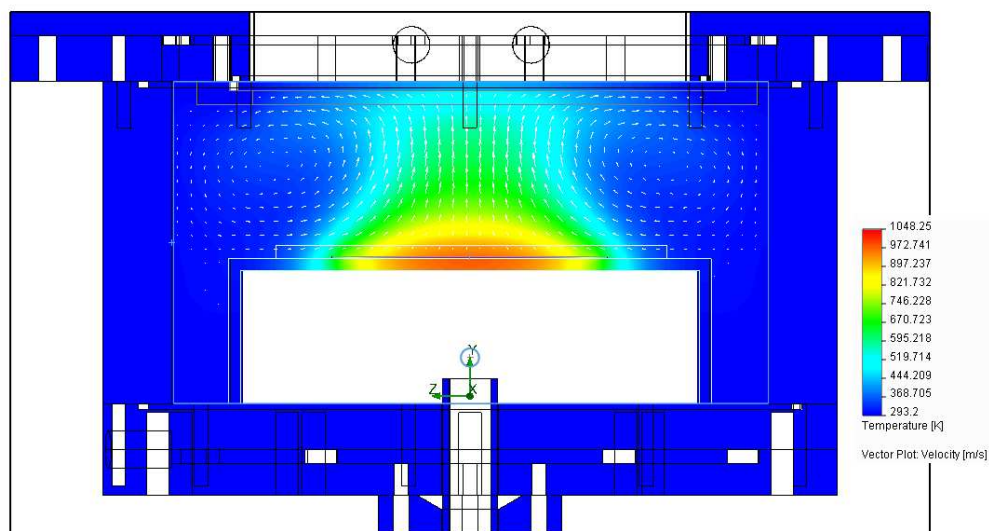


Imagem 4.50 Distribuição de temperatura nos componentes sólidos do reactor, amostra e fluido, e vectores de velocidade (a branco) relativos ao movimento do fluido. Corte longitudinal em relação à amostra.

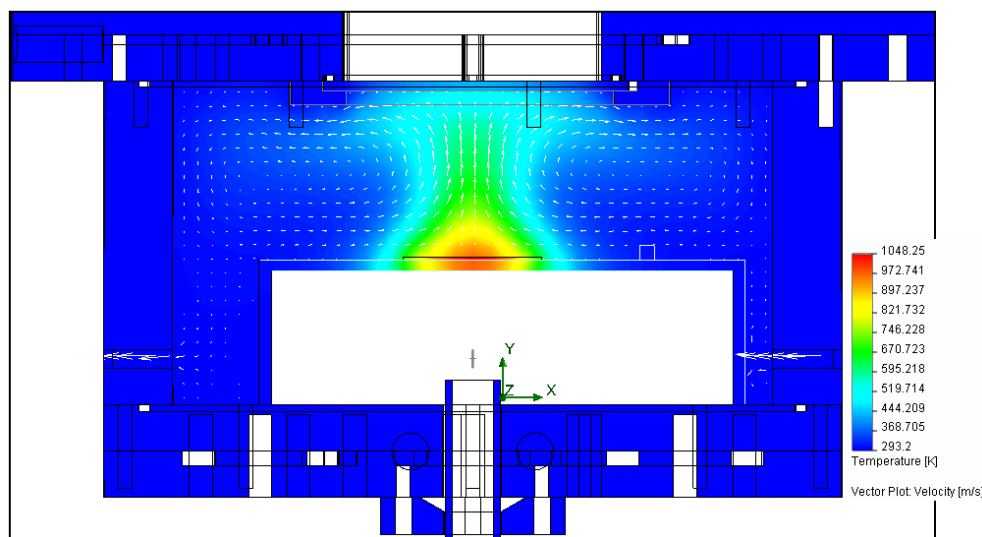


Imagem 4.51 Distribuição de temperatura nos componentes sólidos do reactor, amostras e fluido, e vectores de velocidade (a branco) relativos ao movimento do fluido. Corte transversal em relação à amostra.

Em primeira análise dos resultados obtidos, aponta-se para o facto de que, apesar de se injectar o fluido no reactor com uma determinada velocidade, o seu fluxo é suficientemente baixo para que a convecção natural seja dominante em relação à forçada, como se verifica pela formação de células convectivas ao longo do volume da cavidade (Imagens 4.47 a 4.49). A geometria cilíndrica da cavidade do reactor mostrou-se favorável à criação de células de convecção. As células de convecção são criadas devido à diferença de temperaturas entre as paredes e a formação em pluma de gás quente que ascende a partir da amostra aquecida. Este efeito é típico nos regimes de convecção natural em cavidades, através do estabelecimento de forças de flutuabilidade [11] no seio de um fluido em que existem gradientes de temperatura, aqui promovidos pelo aquecimento do gás. O gás aquecido na amostra vai perdendo energia à medida que se afasta desta até atingir a janela de quartzo, mais fria, onde acaba por ser escoado em direcção às paredes do reactor arrefecidas (a 293.15 K), e por acção gravitacional, desce até ser novamente sujeito às forças de flutuabilidade ou ser sujeito ao escoamento. O gás, aqui considerado compressível, quando é escoado pela abertura, mantida a pressão atmosférica e de diâmetro reduzido, é acelerado consideravelmente (Imagem 4.51).

Na imagem seguinte observa-se a distribuição da temperatura à superfície da amostra, resultante das trocas de calor por convecção, radiação e condução em cada ponto da amostra. A análise deste resultado só pode ser tida em conta do ponto de vista qualitativo e como uma aproximação muito pouco rigorosa devido às suposições feitas em relação às propriedades térmicas consideradas para o material da amostra. Contudo, numa situação de

equilíbrio a condução térmica ao longo do volume da amostra (de espessura reduzida) tende a não ser significativa comparativamente com trocas de calor a nível da superfície, sobretudo tendo em conta a reduzida condutividade térmica da amostra.

A distribuição da temperatura na superfície da amostra é semelhante à distribuição do fluxo de calor aplicado na superfície. No entanto, este apresenta declives mais suaves entre as temperaturas mais elevadas do centro e as mais baixas na periferia (imagens – gráficos da temperatura). Na base desta suavização está a transferência de calor por condução ao longo da amostra.

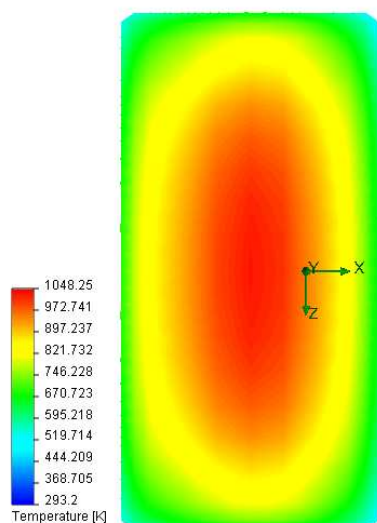


Imagem 4.52 Distribuição da temperatura na superfície da amostra.

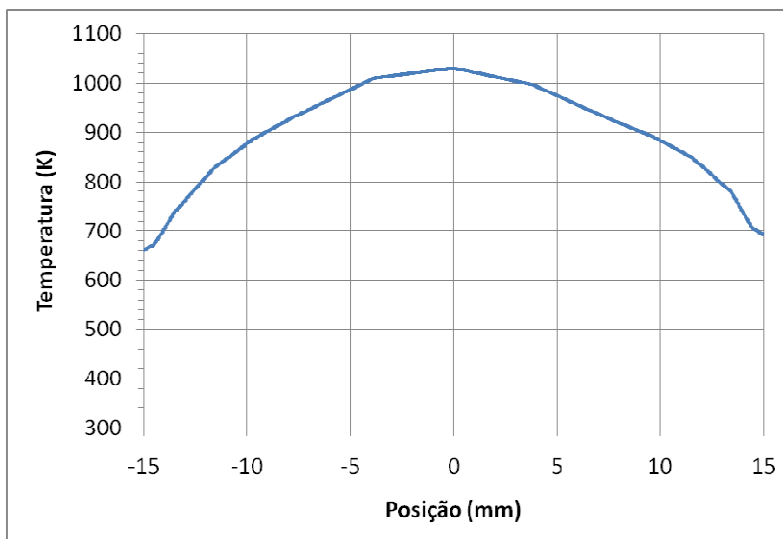


Imagem 4.53 Distribuição da temperatura ao longo do centro da amostra segundo a direcção x.

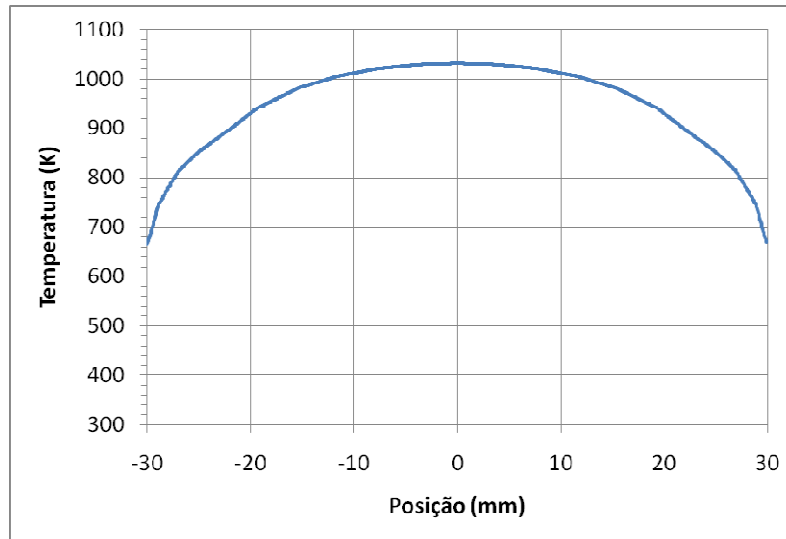


Imagem 4.54 Distribuição da temperatura ao longo do centro da amostra segundo a direcção z.

Os gráficos da velocidade do gás junto à superfície da amostra em ambas as direcções, x e z, revelam a dinâmica das células de convecção. Na região central da amostra, o movimento do fluido é praticamente ascendente, dominado pela componente de velocidade y. Sobre a restante área da amostra, o gás move-se em direcção ao centro a velocidades decrescentes até que a componente y domine, criando assim estrutura convectiva toroidal observada nos resultados das trajectórias do fluxo gasoso. A velocidade do gás nos bordos da amostra é portanto dominada pelas componentes horizontais, que atingem valores consideravelmente superiores comparativamente com as do centro da amostra. Este resultado reflecte-se também no arrefecimento da amostra por convecção, como se observa com a variação do coeficiente de transferência de calor por convecção (h_{cv}) nos gráficos seguintes. Estes comprovam a dependência de h_{cv} da velocidade do fluido, especialmente num regime extremamente turbulento. Os valores de h_{cv} obtidos apresentam picos máximos nas regiões periféricas da amostra e diminuem à medida que se aproxima do centro da amostra, até cerca de metade.

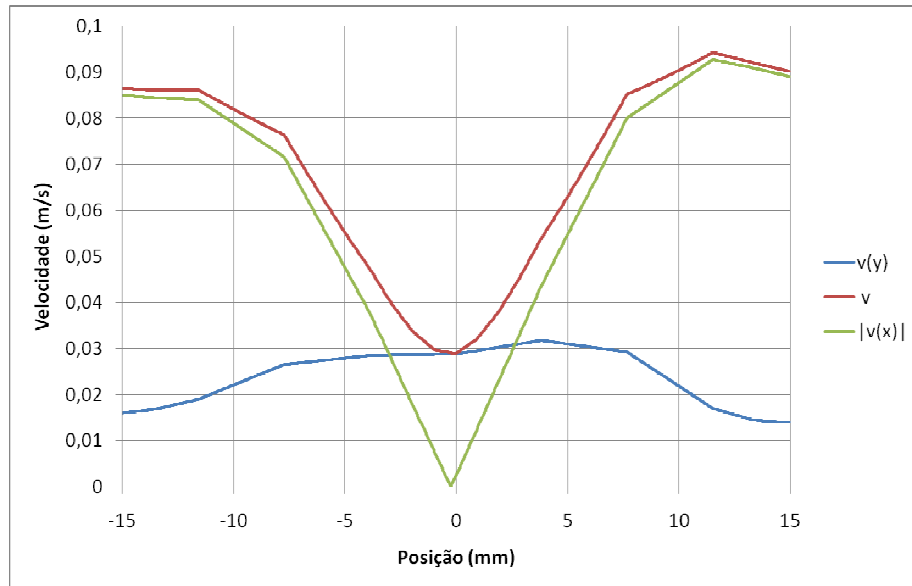


Imagem 4.55 Valores de velocidade do fluido a 1mm de altura ao longo do centro da amostra segundo a direção x.

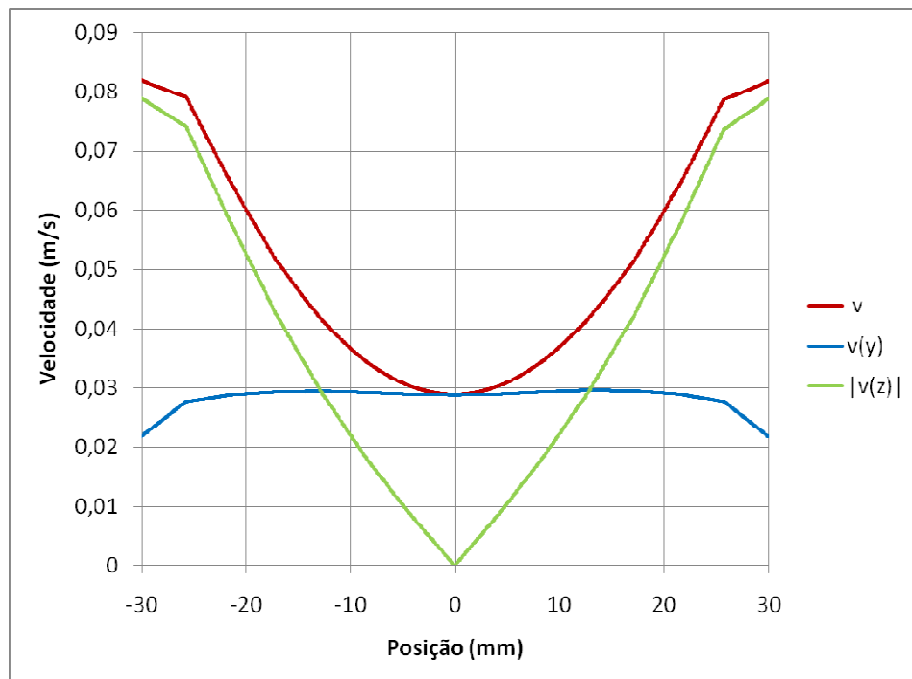


Imagem 4.56 Valores de velocidade do fluido a 1mm de altura ao longo do centro da amostra segundo a direção z.

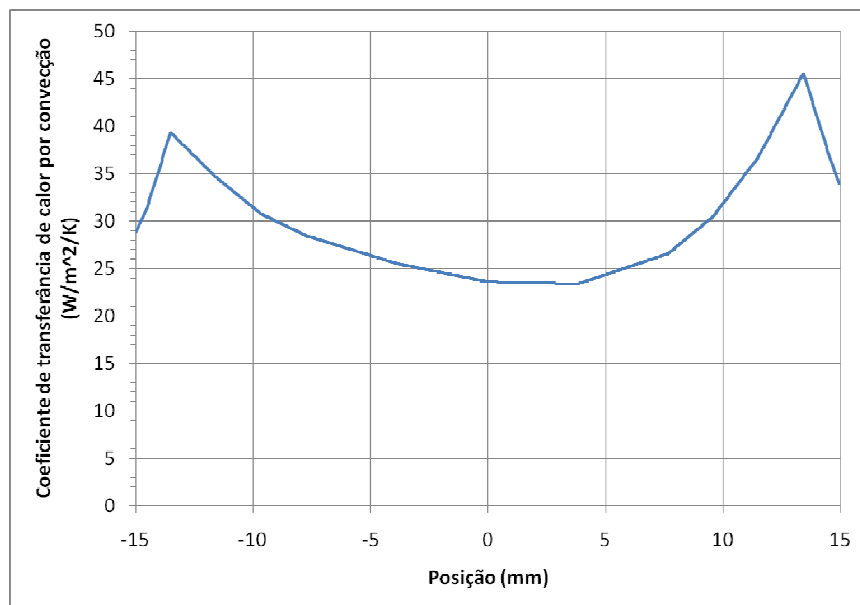


Imagem 4.57 Valores do coeficiente de transferência de calor por convecção estabelecidos junto à superfície ao longo do centro da amostra segundo a direcção x.

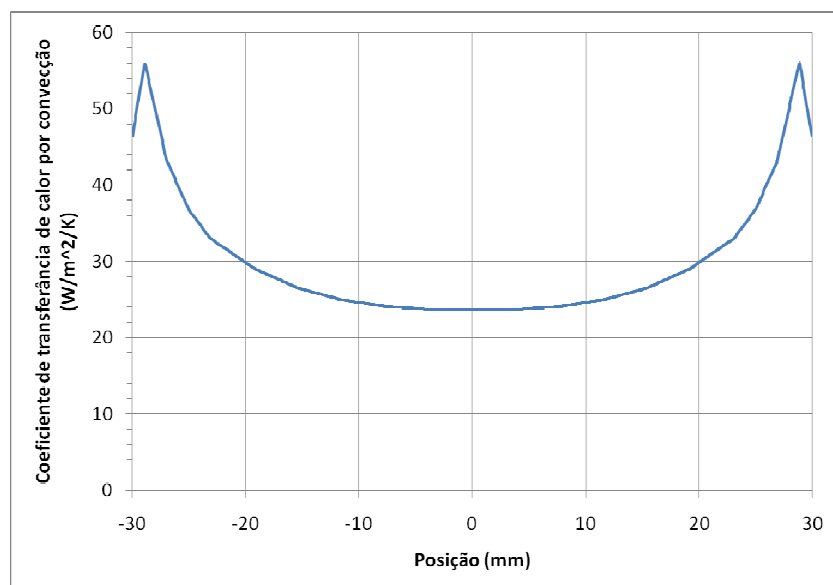


Imagem 4.58 Valores do coeficiente de transferência de calor por convecção estabelecidos junto à superfície ao longo do centro da amostra segundo a direcção y.

Na secção seguinte aborda-se a correlação dos resultados obtidos nesta simulação com os perfis de deposição obtidos experimentalmente por Cláudia Pinto [7].

4.2.5 Medidas experimentais da distribuição da deposição no filme

As fotografias que se apresentam na Imagem 4.59 correspondem aos resultados de uma deposição de 5 minutos, feita no reactor SDS, em que o *input* de potência eléctrica fornecida ao sistema radiativo foi de 1988.5 W. De acordo com as medições de temperatura feitas por Cláudia Pinto para o centro da amostra nestas condições de potência radiativa, o pico da temperatura alcançado nesta deposição deve rondar os 1003 K.



Imagem 4.59 Amostra de pó de silício antes da deposição (à esquerda); Faces posterior e anterior pós-deposição (ao centro e à direita, respectivamente).

A amostra foi mergulhada em resina e posteriormente cortada (segundo o esquema da Imagem 4.60) e polida de forma a avaliar o perfil de deposição de silício no substrato por observação em lupa.

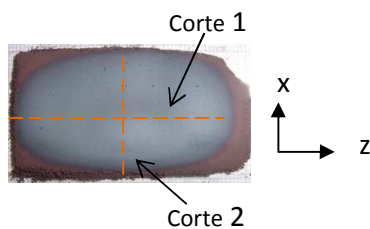


Imagem 4.60 Esquema de corte adoptado.

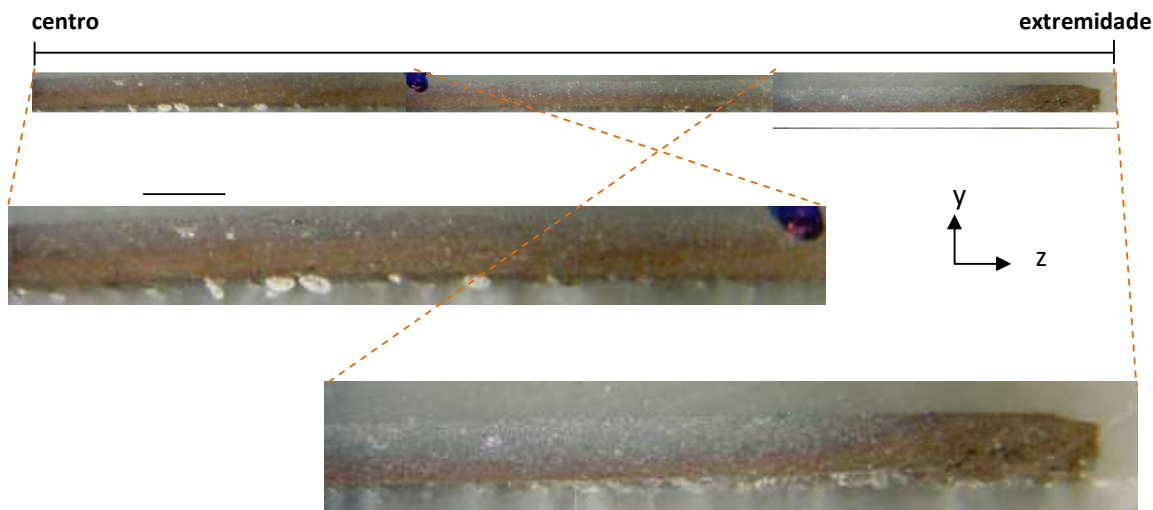


Imagem 4.61 Perfil da metade direita do corte longitudinal (corte 1) da amostra. A espessura do total da amostra encontra-se entre os 0,5 e 1 mm.



Imagem 4.62 Perfil de metade do corte transversal (corte 2) da amostra.

Em ambos os perfis apresentados nas imagens 4.61 e 4.62, observam-se duas regiões de coloração e porosidades distintas. A camada junto à superfície, de cor cinzenta, corresponde ao filme resultante da deposição, e abaixo deste, de cor castanha e mais porosa encontra-se a camada de pó de silício.

No corte longitudinal observa-se que nos primeiros milímetros, imediatamente a seguir à extremidade da amostra, não existem vestígios de deposição de silício. Mas logo que estes aparecem, rapidamente se tornam num filme quase tão espesso como o substrato. À medida que se aproxima do centro a espessura do filme diminui, até atingir cerca de metade da espessura da máxima observada. No perfil do corte transversal, observa-se um comportamento semelhante à exceção do troço inicial, que neste caso começa logo por apresentar vestígios de deposição. As fotografias da Imagem 4.59 sugerem que esta distribuição em profundidade da deposição ocorre radialmente em relação ao centro da amostra, na face posterior verifica-se uma mancha central (ligeiramente desviada para a direita) que se pode associar a uma zona mais fina e portanto de baixa deposição, na face anterior

observam-se regiões (cinzentas) que evidenciam deposição ao longo de toda a espessura do substrato.

A inexistência de um estudo analítico para este tipo de deposição num substrato poroso por CVD em regimes de pressão atmosférica e baixas temperaturas, dificulta a tarefa de compreender os perfis observados. Porém, os resultados obtidos na simulação da secção anterior (secção 4.2.4.1) fornecem pistas relevantes.

No cruzamento dos dados obtidos por simulação com os perfis de deposição observados, constata-se um paralelo entre a distribuição de temperatura e de deposição na amostra (imagens 4.61 e 4.62). Junto aos bordos do substrato, em que as temperaturas são mais baixas não se verifica deposição de silício. A deposição a maior profundidade ocorre no “anel elipsóide”, em torno do centro da amostra, e não onde a temperatura é superior, que corresponde à região onde o filme é menos espesso. À partida esperar-se-ia uma maior taxa de deposição na região central uma vez que a eficiência da decomposição do silano depende da energia térmica que lhe é fornecida.

Os resultados obtidos para a velocidade do elemento gasoso junto à superfície do substrato, revelam também um paralelismo em relação aos perfis de deposição. Em ambas as direcções observadas, verificou-se que na região central o movimento do gás é dominado pela componente vertical da velocidade, e portanto, é razoável considerar que nesta zona, apesar de apresentar elevadas temperaturas, o vector velocidade do gás tem já uma componente vertical importante, originando por isso uma deposição menor. Por sua vez, na periferia da zona central as componentes horizontais da velocidade do gás são dominantes (gráficos das imagens 4.55 e 4.56), pelo que existe muito silício resultante da pirólise do silano junto à superfície, originando as regiões mais espessas do filme depositado. Assim, à medida que se aproxima do centro, a componente vertical da velocidade vai aumentando e consequentemente a espessura do filme diminuindo. A fraca deposição junto aos bordos da camada de pó de silício, ainda que aí exista igualmente uma componente horizontal dominante no fluxo estará relacionada com o facto de na periferia as temperaturas na camada de pó não serem suficientemente altas para decompor o silano eficientemente.

5 Projecto do reactor SDS de 2ª geração

5.1 Descrição do reactor

Com o reactor de CVD de 1ª geração conseguiu demonstrar-se a viabilidade do processo na formação de fitas de silício para aplicação fotovoltaica [7] e [9]. No entanto, apesar de se terem conseguido produzir células de alta qualidade a partir das placas de silício auto sustentadas (pré-fitas), a falta de uniformidade da deposição e consequente variação da porosidade verificada ao longo das placas, induzem frequentemente o colapso da zona fundida no processo de recristalização por varrimento por fusão de zona (ZMR). O baixo índice de sucessos na recristalização das pré-fitas (placas de Silício) produzidas por CVD, associado à necessidade de adaptação do reactor a um processo contínuo compatível com uma cadeia de produção, revelaram a necessidade de projectar um novo reactor CVD.

O projecto de um reactor de 2ª geração baseia-se no mesmo princípio básico para a formação de placas de silício. É utilizada a técnica de CVD em regime de baixas temperaturas e a pressão ambiente. A fonte gasosa de silício, o silano (SiH_4 (g)), é decomposta segundo a seguinte reacção de pirólise:



O composto gasoso difunde-se através do nano-pó de silício, que constitui o substrato, e decompõe-se nos locais onde a energia térmica fornecida é suficiente para realizar a pirólise. Deste processo resulta a agregação das nanopartículas num filme que assenta na restante camada de pó. Desta forma não é necessária a introdução de um substrato típico das técnicas de CVD de crescimento epitaxial. Assim se assegura a ausência de contaminação do filme por um substrato de material diferente e na maior facilidade no destacamento (*lift-off*) do mesmo, por se encontrar sobre uma espessa (pelo menos de espessura igual à do filme) camada do mesmo pó que lhe deu origem.

As ideias fundamentais que constituem as principais características que distinguem o projecto do reactor de 2ª geração, como uma solução de optimização do desempenho na produção de pré-fitas de silício para produção fotovoltaica e a nível ecológico e económico, são:

- (i) a existência de várias fontes de calor ao longo do reactor que juntamente com os fenómenos de convecção adequados visam rentabilizar ao máximo a decomposição do silano em silício sólido;
- (ii) o substrato de pó de silício é sujeito a um movimento lento de translação de modo a garantir que todos os pontos sejam sujeitos às mesmas condições no sentido da translação, o que assegurará maior uniformidade de espessura e porosidade ao longo das pré-fitas;

- (iii) (iii) as fontes de calor, radiativas, são focadas na menor área possível do leito de pó, minimizando a criação de perfis de deposição irregulares ao longo da direcção transversal da pré-fita;
- (iv) (iv) o processo de destacamento da pré-fita deverá ser físico e não químico, podendo utilizar total ou parcialmente o movimento incutido ao próprio conjunto pré-fita/substrato como força motriz.

De acordo com estas características deverá ter-se especial atenção aos seguintes critérios de carácter funcional e estrutural no desenho do protótipo deste novo reactor:

- Permitir a sua implementação num processo em cadeia, localizado entre uma unidade de produção de pó de silício e uma de recristalização por varrimento de zona fundida;
- Não deve incluir no seu interior fontes de ignição devido à atmosfera rica em $H_{2(g)}$ e $SiH_{4(g)}$, pelo que as fontes de radiação devem permanecer no exterior;
- O perfil de concentração da radiação sobre o substrato deve ser tal, que permita formação de pré-fitas autosustentadas de 40 mm de largura e pelo menos vários centímetros de comprimento (p. ex. 24 cm);
- Não deve possuir materiais potencialmente contaminantes, que coloquem em risco a qualidade das pré-fitas de silício.
- O suporte deve permitir que o transporte do substrato, enquanto ainda é um depósito de pó, seja feito de modo a que este mantenha a forma e compactação adequadas. Após a deposição do filme de silício, deve assegurar a sua integridade. O material do suporte deve garantir que não ocorra a agregação da pré-fita durante a deposição, o que facilitará o destacamento (*lift-off*) da pré-fita à saída do reactor;
- A acomodação do pó de silício à forma pretendida e o procedimento de destacamento devem ser executados ainda dentro da cavidade do reactor de forma a evitar o contacto do silício com atmosferas não controladas, e simultaneamente permitir o reaproveitamento de pó não agregado por CVD.

De um modo geral a satisfação deste conjunto de critérios levaram a conceber uma ideia inicial de um reactor de forma paralelepípedica que possa ser ligado a um sistema de alimentação de pó e a um sistema de destacamento, tendo várias zonas quentes de deposição. No diagrama seguinte encontra-se representado um esquema genérico de princípio do reactor SDS de 2ª geração:

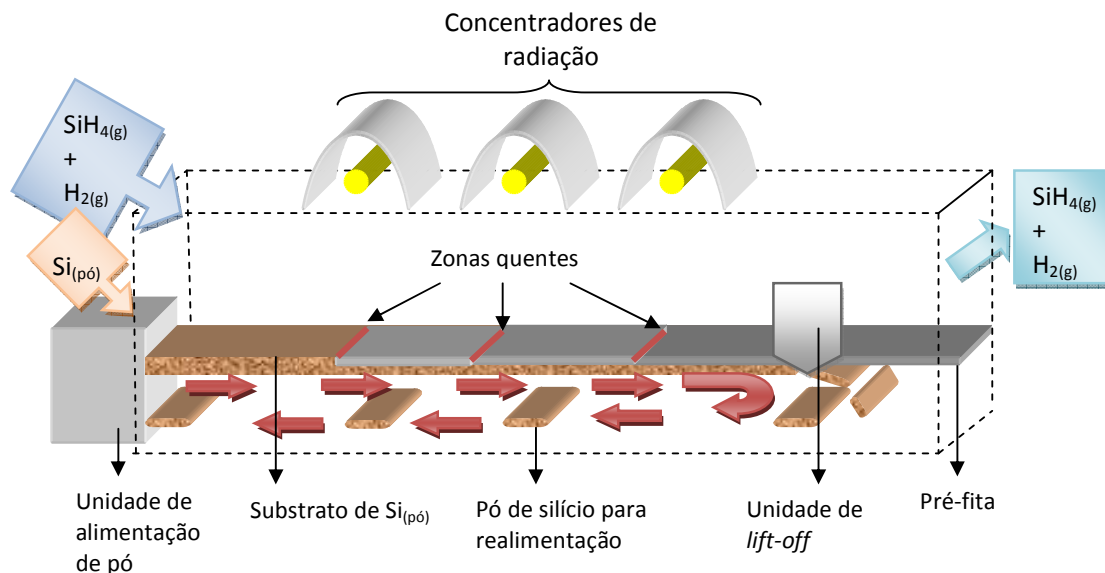


Imagem 5.1 Esquema de funcionamento do reactor SDS de 2ª geração.

O estudo deste novo forno deve abordar o tipo de fontes de calor a utilizar; a convecção dentro do reactor (ou da dinâmica do gás dentro do reactor); o sistema mecânico de translação; o processo de formatação e compactação do pó de silício; e o processo de destacamento da pré-fita. No âmbito deste mestrado apenas se exploram o tipo de fontes de calor e a convecção dentro do reactor, que são indissociáveis, pois os fenómenos de dinâmica do gás dentro da cavidade do reactor dependerão da natureza das fontes de calor. Estes dois aspectos são, sem sombra de dúvida, muito importantes para o dimensionamento da geometria do reactor, como se mostrará adiante.

5.2 Análise da convecção no interior do reactor

Como já foi referido, pretende-se neste reactor rentabilizar ao máximo a decomposição do silano em silício sólido. A ideia básica para garantir o esgotamento da fonte de silano é fazer circular a mistura gasosa junto às zonas onde existe energia térmica suficiente para que ocorra a reacção de pirólise. Pretende-se conseguir este efeito ajustando as características do reactor e as condições de fluxo gasoso de modo a que se constituam células de convecção junto às zonas de deposição (imagem VIII-2).



Imagem 5.2 Esquema de circulação do gás junto à zona de decomposição do silano (a vermelho) por via de células de convecção

A existência de várias zonas de deposição torna a tarefa de modulação das células de convecção extremamente complexa, pois estas têm de se confinar mutuamente ao longo da cavidade do reactor. A reprodução analítica deste efeito em regimes de fluxo gasoso turbulento é extremamente complicada, pelo que se optou por recorrer à simulação em *FloWorks*. Para este estudo o *software FloWorks* constitui uma ferramenta de enorme utilidade, uma vez que permite conceber, testar e adaptar a geometria do reactor com relativa facilidade e rapidez.

5.2.1 Simulação da convecção em *FloWorks*

Nos modelos considerados para as simulações feitas neste estudo, cujos resultados relevantes estão expostos e discutidos mais à frente nesta secção, recorreu-se a considerações e aproximações da mesma natureza das tidas em conta na secção da simulação do fluxo interior no reactor de 1ª geração (secção VII.4.1). Quanto aos modos de troca de calor: não foi considerada a troca de calor por radiação entre corpos; as zonas que seriam sujeitas a um fluxo radiativo (W/m^2), foram em vez disso, sujeitas a uma taxa de transferência de calor (W) constante e suficiente para alcançar determinada temperatura em toda a área.

Os materiais da biblioteca da *FloWorks* usados nas estruturas das análises foram : Alumínio, quartzo e isolantes térmicos ideais. O fluido considerado na simulação é também composto apenas por $H_{2(g)}$. Para o material que pretende simular o substrato, foi seleccionado o silício cristalino em estudos preliminares e o material caracterizado anteriormente, nas simulações da convecção no reactor SDS de 1ª geração.

O estudo efectuado pretende relacionar vários factores que determinam a formação de células de convecção no interior do reactor, a forma que estas podem assumir e que efeitos têm na distribuição da temperatura ao longo do substrato. Para tal analisou-se a influência de zonas quentes (de deposição) dentro de cavidades para diferentes condições de fronteira de pressão e fluxo de fluido, diferente número de zonas e afastamento entre elas, a influência das propriedades térmicas dos materiais em contacto com o fluido e a influência dos próprios parâmetros geométricos da cavidade, tendo em conta o fluxo de gás no reactor.

Numa primeira fase do estudo tentou correlacionar-se a variação dos diversos parâmetros em cavidades genéricas, em simulações de complexidade crescente. Na segunda fase aplicou-se o conhecimento adquirido a uma geometria que se propõe para o protótipo do reactor.

5.2.1.1 Efeito da presença de zonas quentes

5.2.1.1.1 Uma zona quente

5.2.1.1.1.1 Numa cavidade cúbica de faces abertas

Na primeira análise explorou-se uma situação simples de convecção natural. A cavidade por onde o fluido circula tem a forma de um cubo com paredes de alumínio de 5 mm de espessura. Centrada e colocada a 5 mm de altura da base, foi colocada uma fita de dimensões 50 mm x 5 mm x 1 mm à qual foram atribuídas propriedades térmicas do silício cristalino [14] e mantida à temperatura de 1023.15 K. As duas faces laterais paralelas ao lado de maior comprimento da fita, assinaladas a azul na imagem VIII-4, correspondem a fronteiras com o fluido exterior à cavidade, onde a pressão é mantida à pressão atmosférica (101.325 Pa). Todas as outras quatro faces internas do cubo são mantidas (arrefecidas) a 293.15 K.

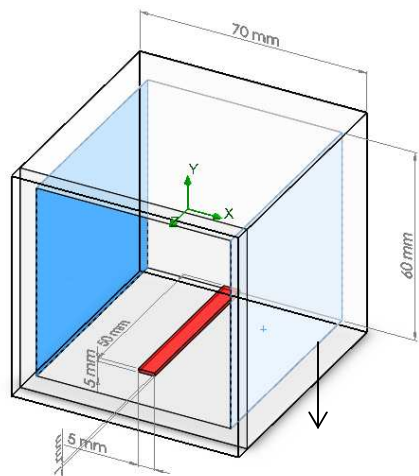


Imagem 5.3 Vista isométrica da cavidade cúbica.

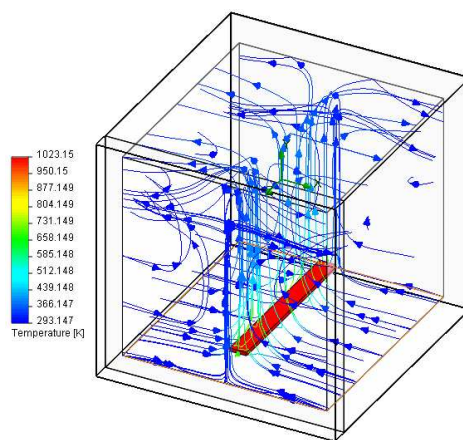


Imagem 5.4 – Trajectórias do fluxo gasoso na cavidade cúbica (vista isométrica).

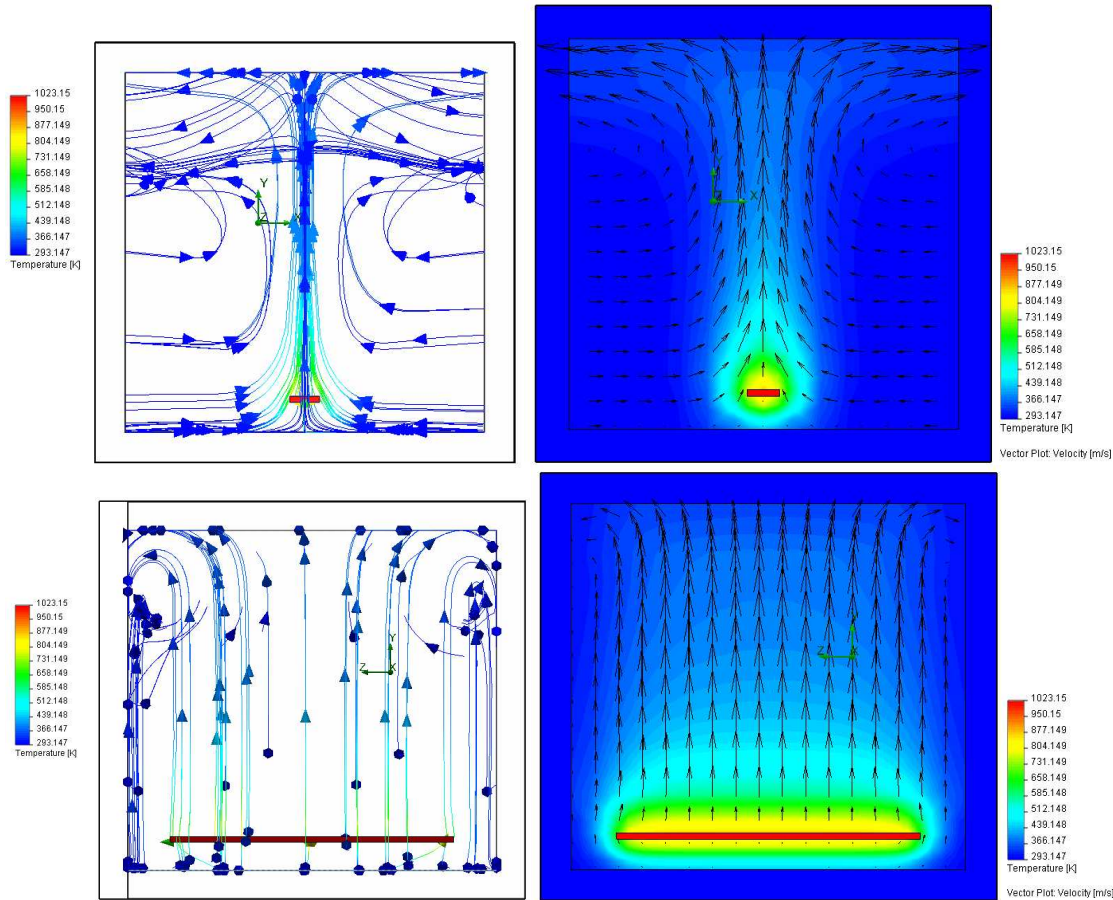


Imagem 5.5 Gráficos de trajetórias do fluxo gasoso à esquerda (em cima, vista transversal em relação à zona quente, e em baixo, vista longitudinal em relação à zona quente), e de temperatura e vectores de velocidade à direita. (em cima, secção transversal em relação à zona quente, e em baixo, secção longitudinal em relação à zona quente).

Os resultados obtidos correspondem ao esperado pela teoria de convecção natural de flutuabilidade [11]. Inicialmente o fluido pode ser considerado imóvel, uma vez que a pressão é igual em toda a cavidade e a velocidade inicial do fluido é nula. Junto à zona quente, o gás tem tendência para se expandir promovendo um gradiente de densidade, uma vez que a densidade decresce com o aumento da temperatura ($\partial\rho/\partial T < 0$). O gradiente de temperatura estabelecido é suficiente para que as forças de flutuabilidade se sobreponham à força da gravidade e promovidas pela viscosidade, e incutam movimento ao fluido. Este movimento ascendente, junto à zona quente, estabelece uma pluma de flutuabilidade. À medida que o gás sobe a partir da zona quente, outras camadas de fluido mais fresco tomam as posições deste, onde a componente vertical da velocidade é maior. Ao longo de y a pluma alarga aumentando o contacto com a fracção de gás frio da cavidade, o que promove o seu arrefecimento e consequente perda de velocidade. Neste caso, o gradiente de temperatura

entre o fluido mais frio e o fluido junto à zona quente é tão elevado, que a pluma se mantém até alcançar a parede superior da cavidade onde a componente y da força de flutuabilidade se anula, e o movimento do fluido passa a ser governado pelas forças da gravidade e viscosidade. No restante volume da cavidade, o gás mantém-se a temperaturas mais baixas do que as do centro da pluma, pelo que o seu movimento deverá ser maioritariamente governado pela viscosidade que promove o seu arrastamento.

5.2.1.1.2 Numa cavidade prismática de bases abertas

Na seguinte situação, manteve-se a posição relativa da zona quente mas agora numa cavidade de maior volume. Esta cavidade corresponde ao alongamento do cubo anterior para um prisma rectangular, em que as fronteiras mantidas à pressão e temperatura ambiente (101.325 Pa e 293.15 K) são as faces mais distantes da zona quente.

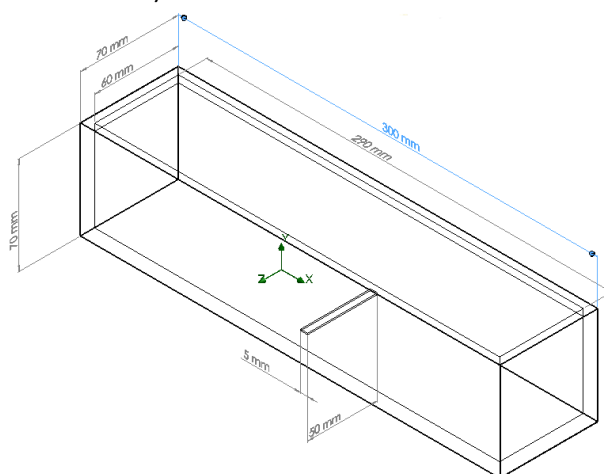


Imagem 5.6 esquema da cavidade prismática com as faces de topo abertas para o exterior.

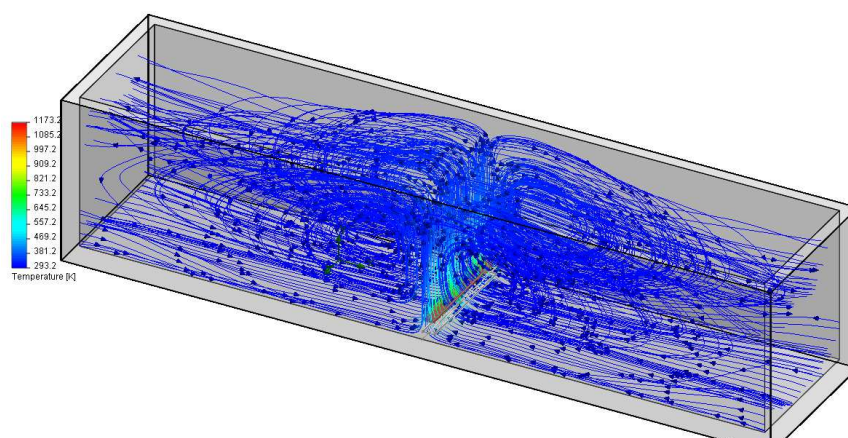


Imagem 5.7 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo abertas para o exterior e uma zona quente ao centro (vista isométrica).

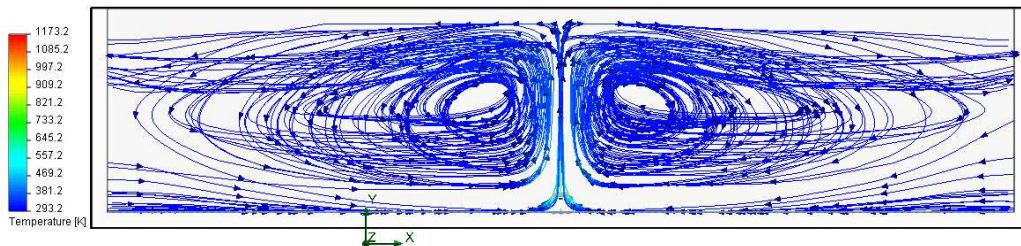


Imagem 5.8 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo abertas para o exterior e uma zona quente ao centro (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Nos gráficos de trajectórias do gás verifica-se a ocorrência do fenómeno de ascensão junto à zona quente, idêntico ao do caso anterior. Ao alcançar a parede superior, o gás descreve trajectórias maioritariamente segundo a direcção x e y , sustentado pelas camadas de gás inferiores em movimento. À medida que o gás arrefecido desce, é novamente sujeito a gradientes de densidade o que promove o seu movimento em direcção à pluma de gás quente, que funciona aqui como uma parede quente, ascendendo novamente. Esta circulação dá origem a células de convecção. As células de convecção aqui observadas apresentam uma forma pouco definida, são mais intensas junto ao jacto de ar quente e vão-se deteriorando à medida que se afastam para as faces extremas.

5.2.1.1.3 Numa cavidade prismática fechada

De modo a compreender melhor a formação de células de convecção num reservatório fechado em que o fluido possui uma velocidade inicial finita não nula, readaptou-se o modelo anterior. As faces laterais que anteriormente correspondiam à condição fronteira de pressão atmosférica, são agora constituídas por alumínio arrefecido a 293.15 K e munidas, cada uma, de um ducto de 10 mm de diâmetro por onde entra ou sai fluido. De acordo com a orientação escolhida na apresentação de resultados, o ducto da esquerda corresponde a uma fronteira adiabática por onde entra fluido em regime 100 % turbulento com um fluxo de 0,4 l/min (fluxo de referência usado no reactor de 1ª geração) à temperatura de 293.15 K. O ducto da direita corresponde a uma fronteira adiabática mantida à pressão ambiente. A face superior foi substituída por quartzo, que na maioria das simulações a seguir apresenta-

das, foi mantida a 293.15 K. A última alteração efectuada foi a distância da zona quente à face inferior interna da cavidade, que passa a assentar directamente na face uma vez que o contacto entre elas foi definido como adiabático.

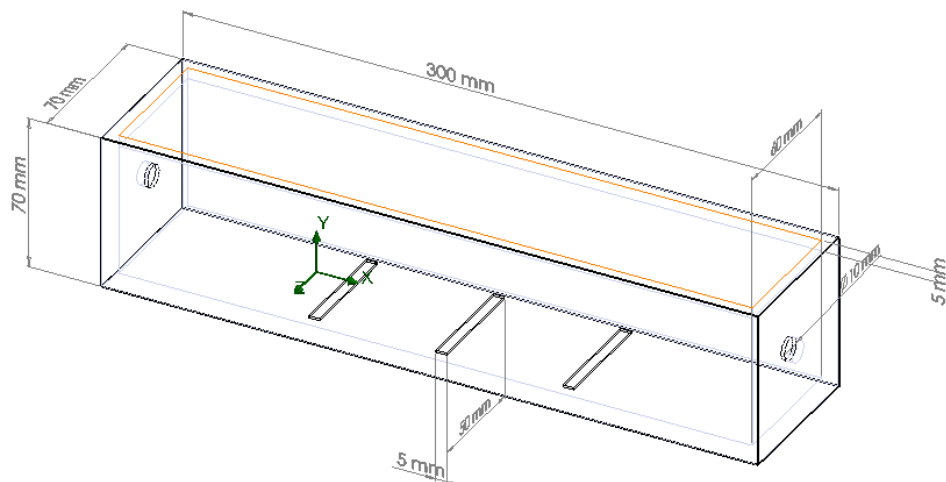


Imagem 5.9 Esquema da cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de orifícios, por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás.

Embora na Imagem 5.9 estejam representadas três zonas quentes, nesta simulação só se considerou a central.

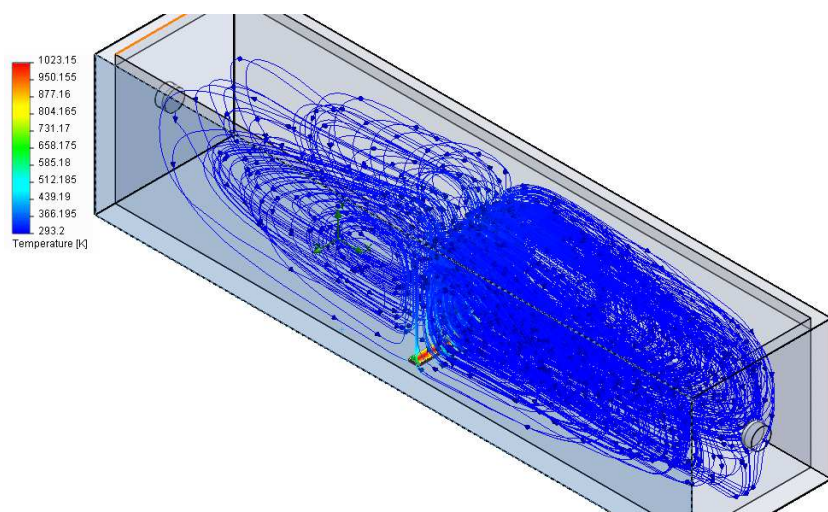


Imagem 5.10 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e uma zona quente central (vista isométrica).

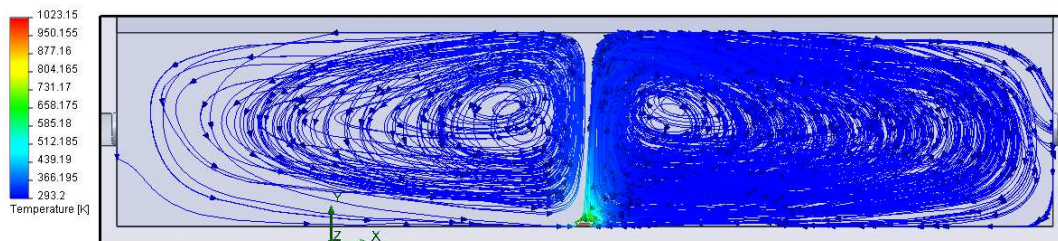


Imagem 5.11 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e uma zona quente central (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Na observação dos gráficos de trajectórias do fluido (Imagens 5.10 e 5.11) é notória a formação de células de convecção, de geometria idêntica às do caso anterior embora a velocidade inicial do gás no interior da cavidade seja diferente de zero. Estes resultados confirmam que a injeção de gás na cavidade não cria fenómenos de convecção forçada relevantes quando é feita mediante um baixo fluxo volúmico de carácter turbulento. Os gráficos mostram as trajectórias de 20 partículas de gás, que claramente são retidas durante mais tempo na segunda célula de convecção. Este efeito revela apenas o papel do estrangimento oferecido à saída do gás, agora feito por um pequeno orifício e não por toda a face da cavidade. Observa-se também que a presença das paredes arrefecidas nos topos laterais da cavidade é determinante na definição da geometria das células de convecção num sistema com estas dimensões, pois o comprimento entre a zona quente e uma destas paredes é suficiente para que o gás arrefeça e desça fechando as células de convecção.

5.2.1.1.2 Várias zonas quentes

Nas simulações apresentadas nesta secção a cavidade mantém-se de acordo com o esquema da Imagem 5.9, distinguindo-se apenas pelo número de zonas quentes incluídas no seu interior.

Duas zonas quentes

Distância entre os centros das zonas quentes : 60mm

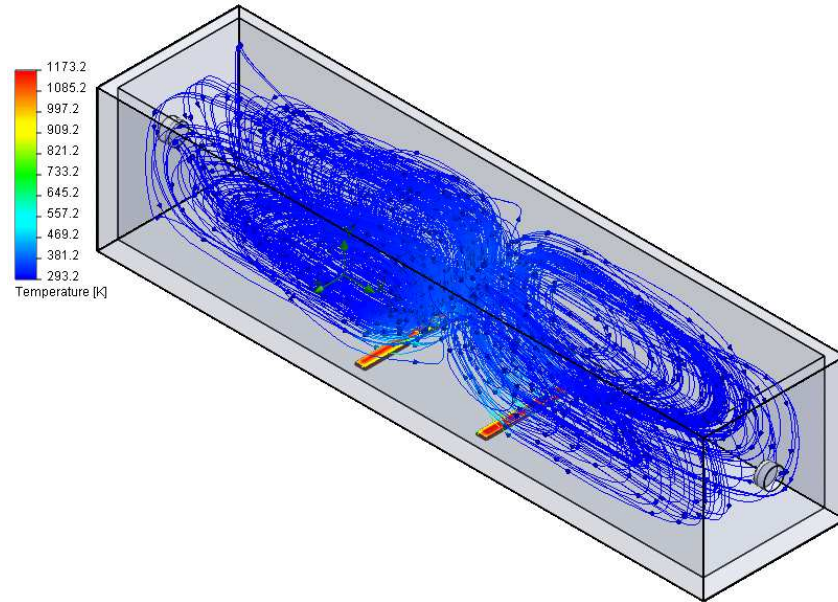


Imagem 5.12 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e duas zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 60 mm. (vista isométrica).

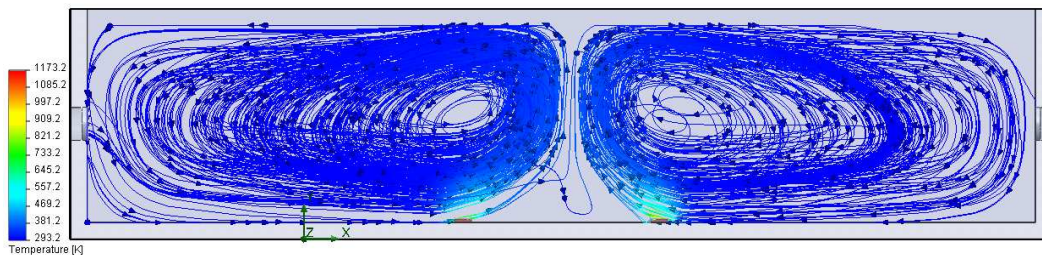


Imagem 5.13 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e duas zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 60 mm. (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Com o aumento do número de zonas quentes idênticas para dois, espaçadas por 6 cm, verificou-se, surpreendentemente, que se continuam a estabelecer duas regiões distintas de fluxo gasoso circulante (células de convecção). No entanto nesta situação a zona quente já não intercepta o plano de simetria entre as células de convecção, pois o fluido neste caso já não ascende logo acima das zonas quentes mas sim após estas, no sentido do movimento do fluido em relação à respectiva zona quente.

Três zonas quentes

Distância entre os centros das zonas quentes : 60mm

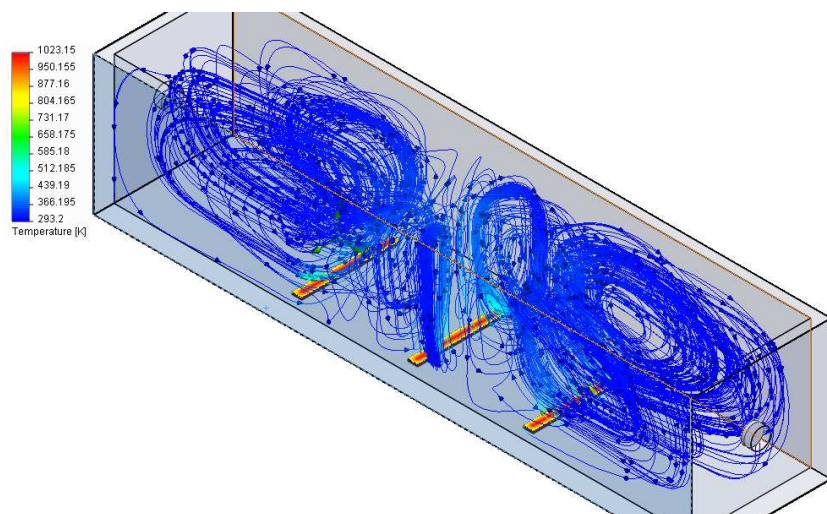


Imagem 5.14 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 60 mm (vista isométrica).

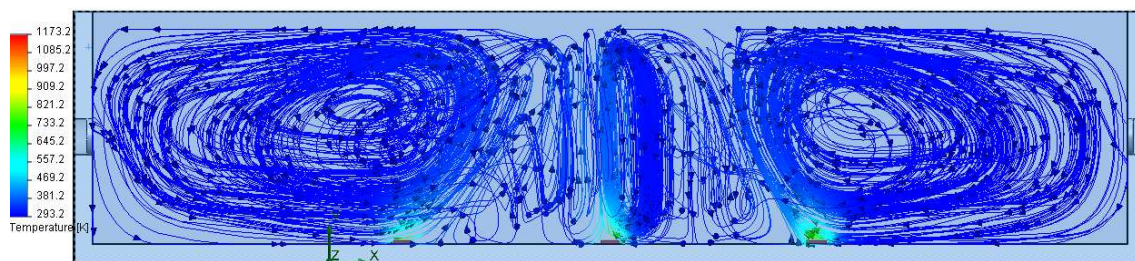


Imagem 5.15 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 60 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Na simulação relativa às três zonas quentes, também separadas por 6 cm entre elas, observou-se que apesar de continuarem a estabelecer-se células de convecção entre as zonas quentes extremas e as paredes arrefecidas, no centro da cavidade sobre a zona quente central verificou-se que o fenómeno de convecção natural é mais complexo. Estes resultados revelam que a formação de células de convecção natural e a sua geometria estão

intimamente relacionadas com o volume disponível na cavidade e/ou disposição das zonas quentes.

5.2.1.1.3 Variação da distância entre zonas quentes e da altura da cavidade

Nesta secção apresentam-se apenas alguns dos resultados que se consideram ser suficientes para retirar conclusões relativamente à correlação entre a forma das células de convecção natural e a distância entre três zonas quentes e a altura da cavidade.

5.2.1.1.3.1 Variação da distância entre zonas quentes

Nas simulações relativas à variação da distância entre as zonas quentes manteve-se a configuração da cavidade representada na Imagem 5.9, em que a altura e a largura são ambas de 60 mm.

Distância entre os centros das zonas quentes: **60mm**.

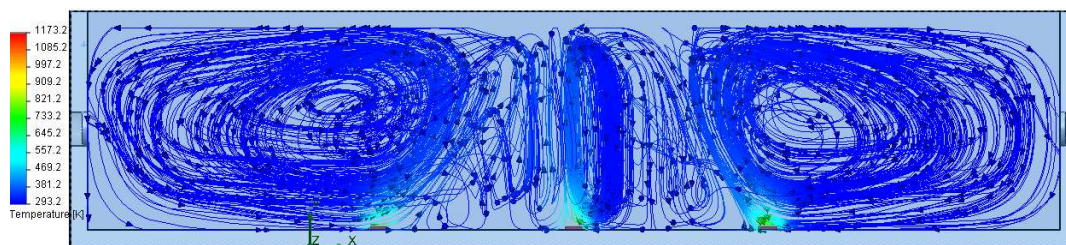


Imagem 5.16 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 60 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Distância entre os centros das zonas quentes: **80mm**.

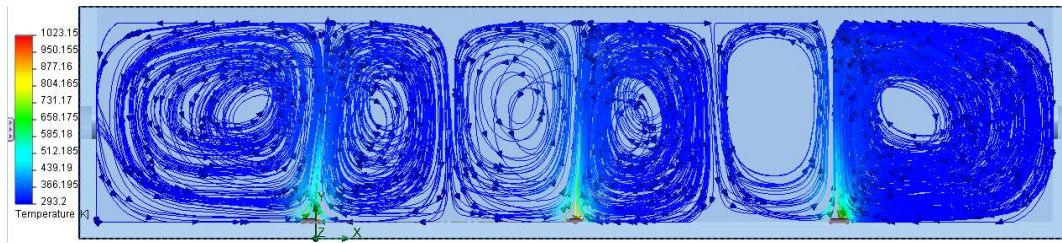


Imagem 5.17 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

5.2.1.1.3.2 Variação da altura da cavidade

Nas simulações relativas à variação da altura da cavidade usou-se novamente a configuração da cavidade representada na Imagem 5.9, em que a largura de 60 mm e a distância entre zonas em 80 mm foram mantidas.

Altura da cavidade: **20 mm**.

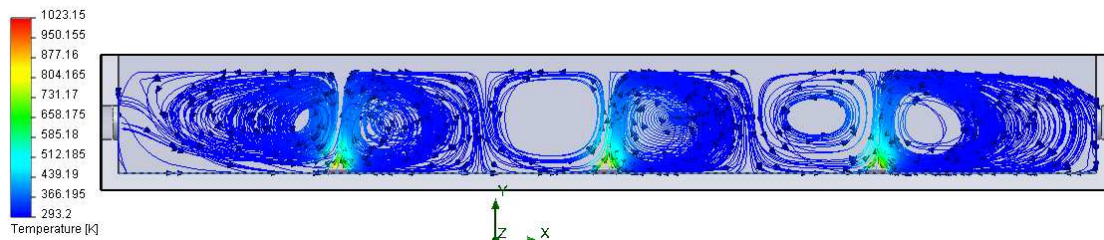


Imagem 5.18 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (20 mm x 60 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Altura da cavidade: **40 mm**.

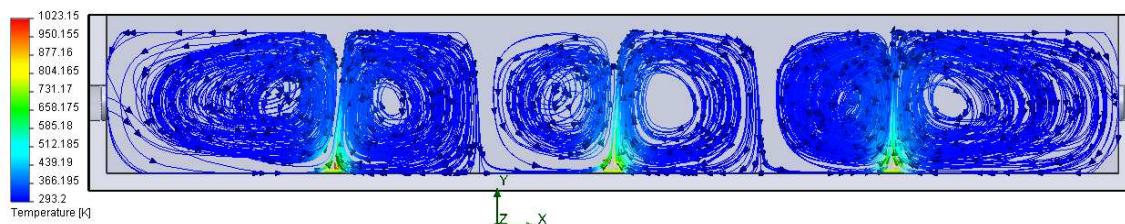


Imagem 5.19 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 60 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extração (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Altura da cavidade: **90 mm**.

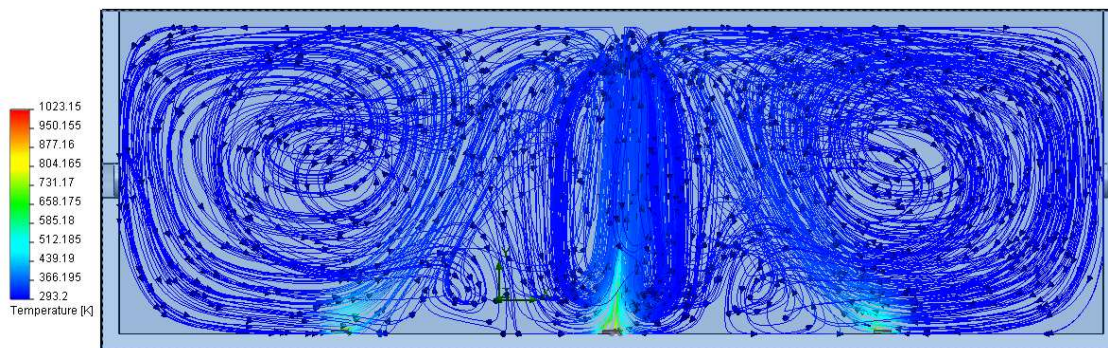


Imagem 5.20 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (90 mm x 60 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extração (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

Os resultados obtidos neste estudo foram reveladores quanto à nítida correlação existente entre as dimensões da cavidade e a formação das células de convecção natural. Observando os gráficos das imagens 5.16 e 5.20, torna-se evidente a existência de um limite máximo de altura da cavidade para determinada distância (d) entre zonas quentes para que exista a criação de células de convecção de carácter pseudo-cilíndrico mais ou menos bem definidas em torno das zonas quentes. Deste resultado, conclui-se que a altura do reactor (H) deve ser menor que d .

Nos gráficos das imagens 5.17, 5.18 e 5.19 verifica-se a formação de células de convecção bem definidas, cada duas alimentadas por uma zona quente. No primeiro, a razão entre H e d é de $\frac{3}{4}$ e as células mostram-se alongadas na direcção vertical. No segundo destes gráficos, $H/d = \frac{1}{4}$, as células centrais apresentam-se ligeiramente distorcidas no sentido

longitudinal da cavidade. No terceiro, relativo à situação em que $H/d = \frac{1}{2}$, as quatro células centrais apresentam uma geometria muito próxima da cilíndrica.

Deste estudo, meramente quantitativo, surge a conclusão de que se a altura da cavidade for inferior à distância entre zonas quentes, formar-se-ão células convectivas e quanto mais próxima a razão entre os comprimentos for de $\frac{1}{2}$, mais próximas da geometria cilíndrica serão as células.

5.2.1.1.4 Efeito de paredes internas adiabáticas juntamente com a variação da largura da cavidade

Até aqui só se prestou atenção aos perfis das células de convecção, em busca de formas circulares que apontem para a formação de células convectivas aproximadamente cilíndricas, quando integradas ao longo do comprimento das zonas quentes. Na imagem seguinte encontram-se representadas as trajectórias do fluido (vista de topo), no caso em que a cavidade prismática tem 40 mm de altura e três zonas quentes separadas por 80mm.

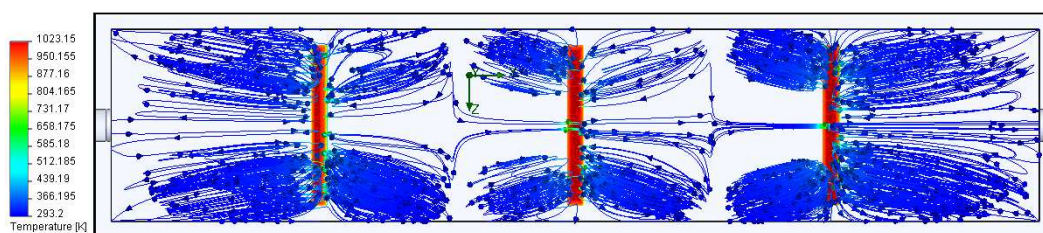


Imagem 5.21 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 60 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm (vista de topo).

O resultado mostra claramente que as células de convecção criadas não são paralelas entre si, ao invés disso formam revoluções angulares ao longo das zonas quentes. É provável que na base deste efeito esteja a criação de forças de flutuabilidade devido à presença de gradientes térmicos entre o gás e as paredes laterais do reactor, que se tornam relevantes por existir ascensão de gás junto dos bordos transversais da amostra, que se encontram separadas das paredes laterais por 5mm.

À partida pretender-se-ia obter células de convecção paralelas entre si e o mais idênticas possível em todas as zonas quentes, de modo a garantir que a sua influência na troca de calor e a sua eficiência na circulação do gás seja idêntica em todas as zonas de deposição. Na tentativa de modelar as estruturas convectivas testaram-se novas soluções, através da implementação de novas condições de fronteira nas paredes laterais e ajustes na largura da

cavidade. Neste âmbito efectuaram-se diversas simulações das quais apenas se mostram três que se consideraram ser clarificadoras. A primeira corresponde à situação em que existe 10 mm de separação entre as zonas quentes e as faces laterais, de alumínio e arrefecidas a 293.15 K (Imagem 5.22). Na segunda, mantiveram-se todos os parâmetros geométricos da cavidade mas substituiu-se o material das paredes laterais por um isolante ideal, de modo a não ocorrer transferência de calor entre estas e o fluido (Imagem 5.23). Por último, testou-se a combinação do efeito na estrutura das células de convecção promovido pela acomodação da largura da cavidade ao comprimento das zonas quentes com a restrição a trocas de calor entre o fluido e as paredes laterais, que são adiabáticas (Imagem 5.24).

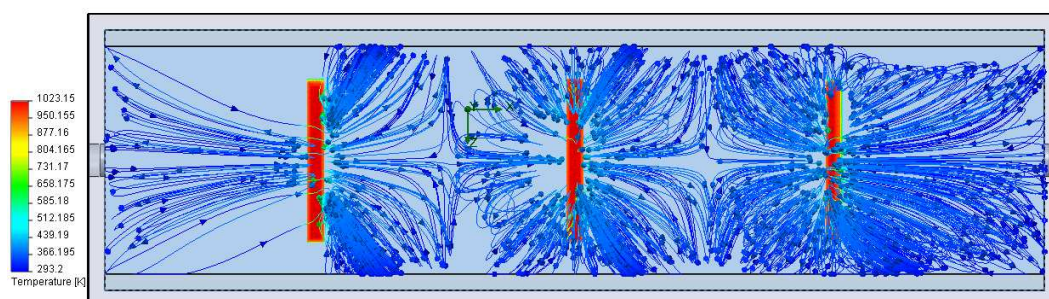


Imagem 5.22 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 70 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm. As paredes laterais são de alumínio e arrefecidas a 293.15K. (vista de topo).

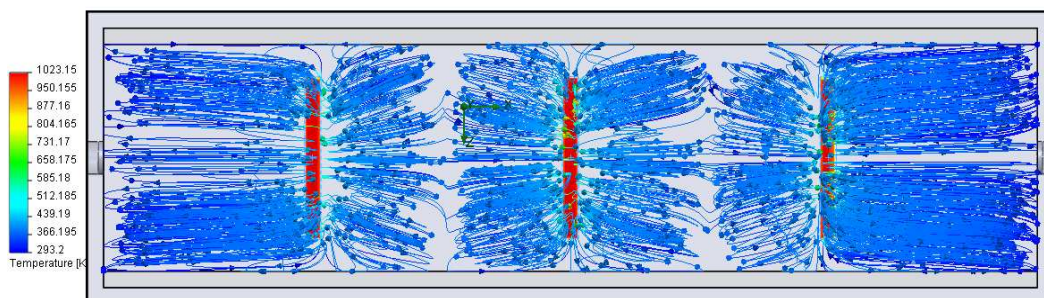


Imagem 5.23 Trajectórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 70 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm. As paredes laterais são adiabáticas. (vista de topo).

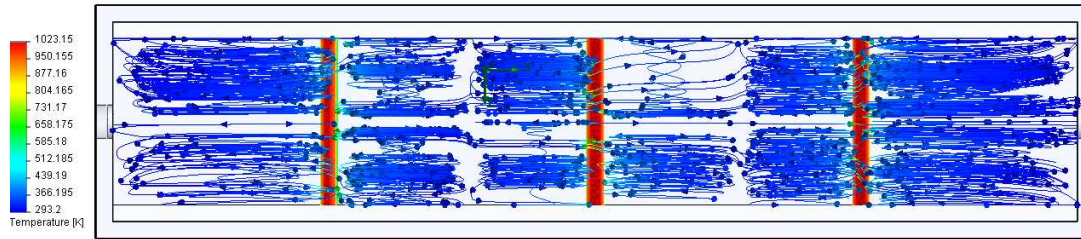


Imagem 5.24 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 50 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm. As paredes laterais são adiabáticas. (vista de topo).

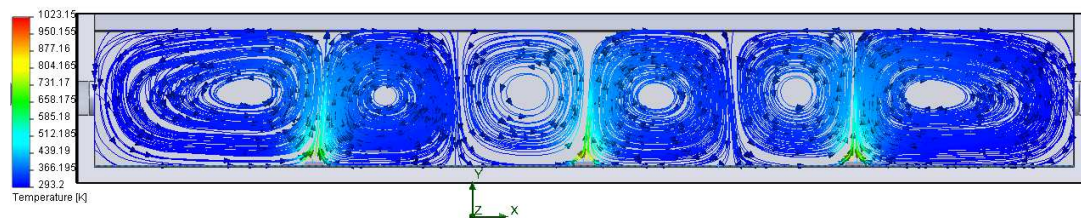


Imagem 5.25 Imagem 5.26 Trajetórias do fluxo gasoso numa cavidade prismática (40 mm x 50 mm x 300 mm) com as faces de topo fechadas e munidas de canais por onde é feita a injeção (esquerda) e extracção (direita) do gás, e três zonas quentes centradas em relação ao centro da cavidade e espaçadas por 80 mm. As paredes laterais são adiabáticas. (vista longitudinal da cavidade e transversal em relação à zona quente).

O resultado do gráfico da Imagem 5.22, mostra o efeito catastrófico promovido pelo afastamento excessivo (para esta geometria) das paredes em relação às zonas quentes. Existindo liberdade de circulação do fluido entre as zonas quentes e as paredes, a acção de forças estabelecidas pelo enorme gradiente térmico promovido por estas estruturas é responsável por criar células de convecção sem uma única orientação, bem definida, sobre as zonas quentes.

No segundo gráfico (Imagem 5.23) verifica-se claramente, que anulando a capacidade das paredes efectuarem trocas térmicas com o fluido circundante, as células de convecção passam a apresentar uma orientação preferencial, perpendicular à do comprimento das zonas quentes. Contudo, continuam a verificar-se ligeiras revoluções angulares devido à liberdade de circulação de fluido entre as extremidades das zonas quentes e as paredes.

A combinação das duas soluções anteriores (Imagem 5.24 e 5.25) mostrou ser, sem dúvida, a solução ideal para modelar as células de convecção, de modo a garantir uniformidade na forma como estas podem afectar a deposição do silício, uma vez que todo o gás aprisionado em cada célula de convecção passará por todos os pontos das zonas quentes com velocidades e orientação idênticas.

5.2.2 Proposta para a geometria do reactor

Nesta secção esboçou-se uma estrutura tridimensional que obedece às principais características pretendidas para o reactor *SDS* de 2ª geração. A estrutura básica proposta para o reactor, e na qual se analisou a dinâmica convectiva em *FloWorks*, encontra-se na seguinte imagem:

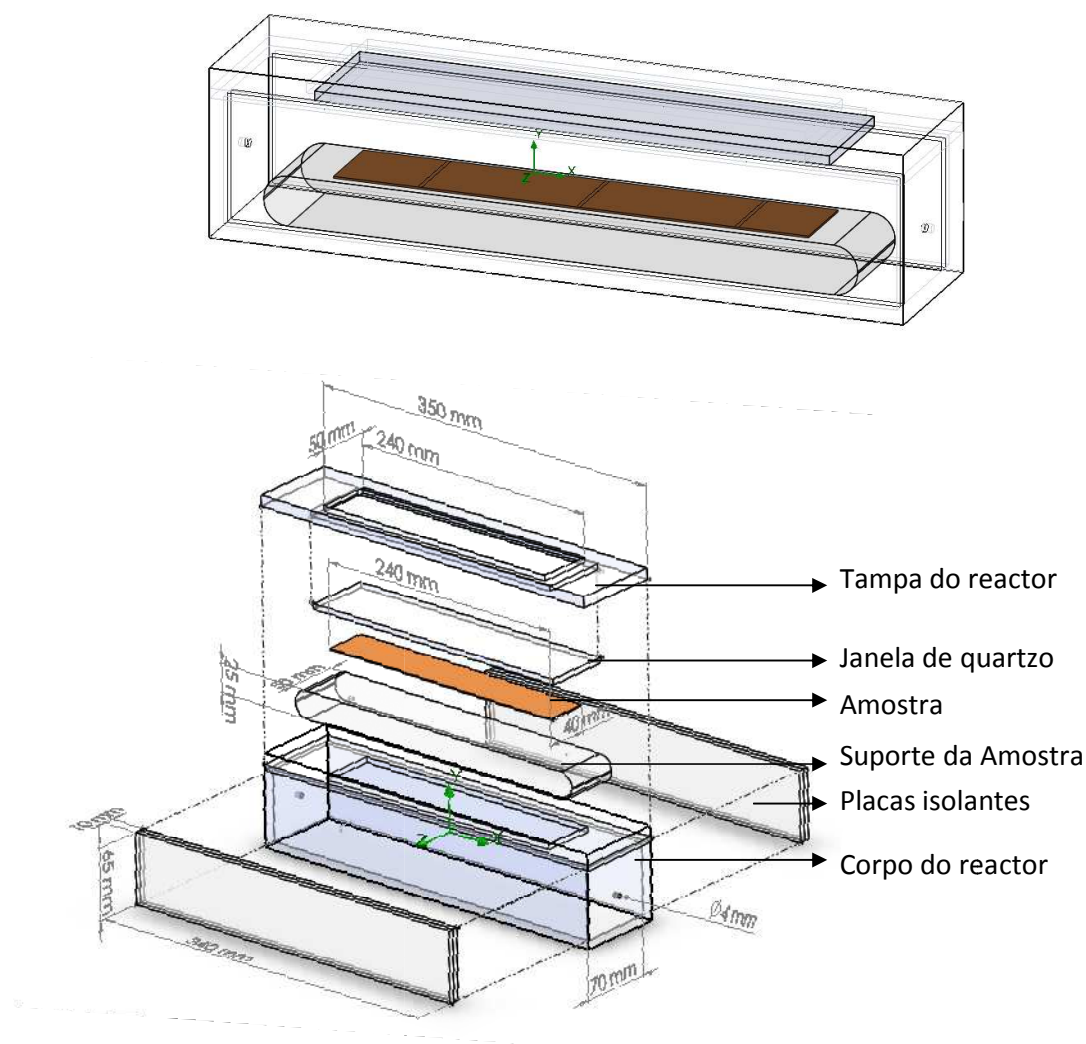


Imagem 5.27 Esquemas da estrutura genérica, proposta para reactor *SDS*.

O reactor foi munido de uma janela na face superior uma vez que as fontes concentradoras de radiação devem estar no exterior da cavidade do fluido. Para o material desta janela seleccionou-se o quartzo fundido, pois é um material indicado para este tipo de aplicação por suportar enormes gradientes de temperatura que se possam estabelecer entre o ambiente exterior e interior do reactor simultaneamente. Embora o pico de absorção do quartzo fundido corresponda à região de comprimentos de onda de interesse para o aquecimento do substrato de pó, a sua aplicação na geração anterior do reactor, provou que a absorção não é significativa para as gamas de potência radiativa utilizadas, pelo que também não deverá representar um problema neste reactor. Quanto à área de abertura disponível na face superior do reactor, considerou-se a suficiente para deixar passar radiação focada capaz de criar zonas quentes de comprimento igual à largura do substrato de pó.

O suporte do pó de silício foi dimensionado de modo a possuir um volume suficiente para implementação de um sistema de translação. Escolheu-se o quartzo para seu material.

As placas isolantes junto às paredes laterais foram introduzidas de modo a ser possível variar, nas simulações, o material desta zona da cavidade do reactor.

Quanto à representação do substrato de pó de silício, optou-se por uma fita de dimensões compatíveis com as que se pretendem obter nas pré-fitas: 40 mm de largura, 240 mm de comprimento e 1mm de espessura. O material utilizado possui as características consideradas na análise convectiva do reactor de primeira geração, apresentadas na secção 4.2.4.1.

A cavidade útil do reactor para a criação de células de convecção possui 340 mm de comprimento, 40 mm de altura e 50 de largura, e corresponde ao volume confinado pelas paredes laterais, pelo suporte da amostra e pela tampa do reactor.

Definida a estrutura base do reactor, procedeu-se a uma série de simulações onde se procurou aperfeiçoar a estrutura e os materiais a utilizar no reactor.

5.2.2.1 Simulação do fluxo interior no reactor

Os denominadores comuns nestas simulações, para além da estrutura apresentada do reactor, foram as seguintes condições de fronteira e iniciais:

- Temperatura inicial do corpo do reactor: 293,15 K;
- Temperatura inicial da janela de quartzo: 393,15 K (temperatura média hipoteticamente alcançada devido à absorção de radiação);
- Fluxo de entrada de $H_{2(g)}$: 4 litros/minuto a 293,15 K;
- Saída do gás: mantida à pressão atmosférica;
- Zonas quentes: a amostra é sujeita a uma taxa de calor constante o suficiente para manter a temperatura a 1023.15 K em três áreas, de dimensões 40 mm x 20 mm, separadas por 80 mm. A zona central localiza-se no centro da amostra.

5.2.2.1.1 1ª Simulação

Nesta simulação as paredes laterais são perfeitamente isolantes (adiabáticas).

Resultados

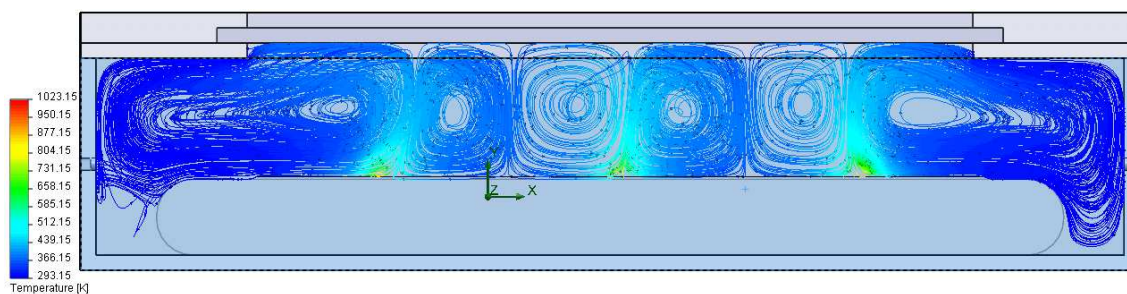


Imagem 5.28 Trajetórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais são isolantes ideais. (vista longitudinal da cavidade do reactor).

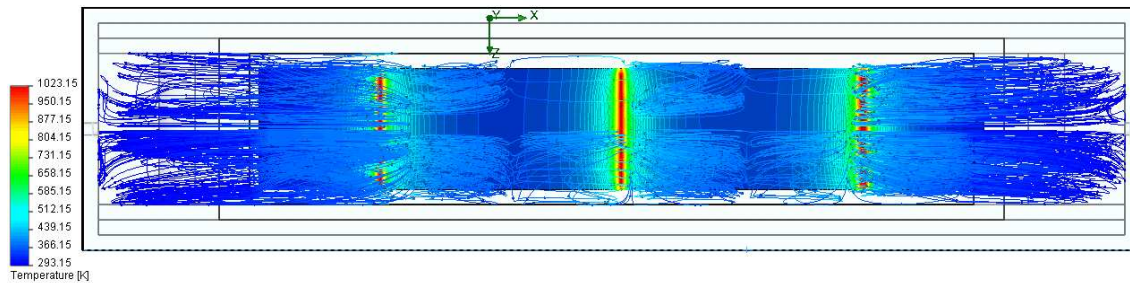


Imagem 5.29 Trajetórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais são isolantes ideais. (vista de topo da cavidade do reactor).

Do ponto de vista da formação de células convectivas de carácter circular, o resultado foi bastante satisfatório. Verificou-se a formação de duas estruturas celulares de convecção em torno de cada zona quente. Junto à zona quente central formaram-se células de convecção muito idênticas, aparentemente com um diâmetro máximo idêntico a metade da distância que separa as zonas quentes. O mesmo já não se verifica com as outras zonas quentes, nestas apenas as células de convecção que se formam no sentido do interior do reactor possuem características geométricas idênticas às formadas pela zona quente central. As células que se formam no sentido das paredes laterais de topo, assumem geometrias mais alongadas uma vez que o gás é deslocado até às paredes arrefecidas.

5.2.2.1.2 2ª Simulação

A diferença na estrutura da convecção ao longo do reactor que se verificou na simulação anterior pode ser responsável por diferentes velocidades do gás junto das amostras o que pode afectar significativamente a taxa de transferência de calor de tipo convectivo nas zonas quentes produzindo variações de temperatura. Caso isto aconteça, os perfis de deposição de silício ao longo do substrato podem vir a apresentar variações significativas ao longo de cada zona de deposição e serem diferentes nas três zonas quentes. A possibilidade de ocorrerem estes efeitos não representa necessariamente um problema grave visto que o principal objectivo deste reactor CVD é assegurar a uniformidade dos perfis de deposição ao longo do substrato. Contudo, garantir que as condições de transferência de calor convectiva e temperatura sejam idênticas nas três zonas de deposição minimiza a complexidade da futura parametrização da dinâmica de decomposição do silano ao longo do reactor.

Com vista a confinar as células de convecção irregulares adjacentes às zonas de aquecimento extremas, de modo a assumirem uma forma idêntica a todas as outras, procedeu-se à adaptação da geometria do reactor introduzindo duas placas isolantes de orienta-

ção vertical (placas de confinamento) junto a estas zonas de aquecimento, a uma distância igual a metade da que separa duas zonas quentes consecutivas (Imagem 5.30).

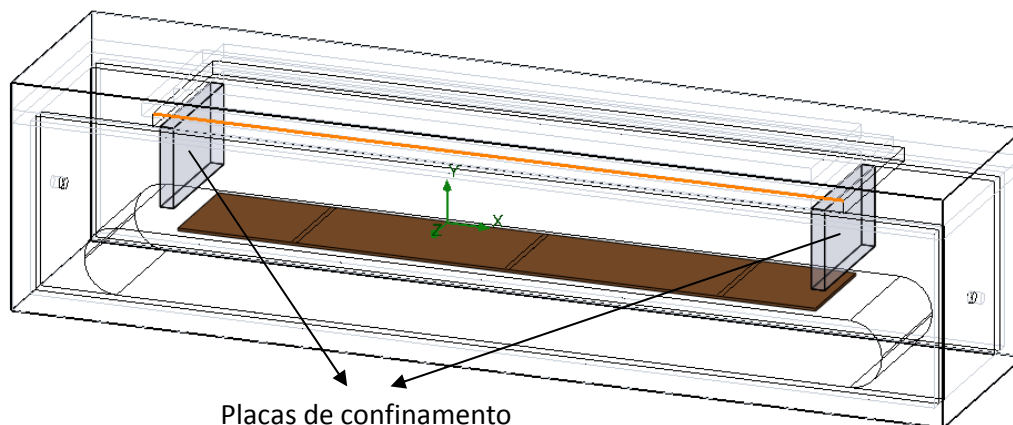


Imagem 5.30 Esquema do reactor SDS de 2ª geração adaptado com placas de confinamento.

Resultados

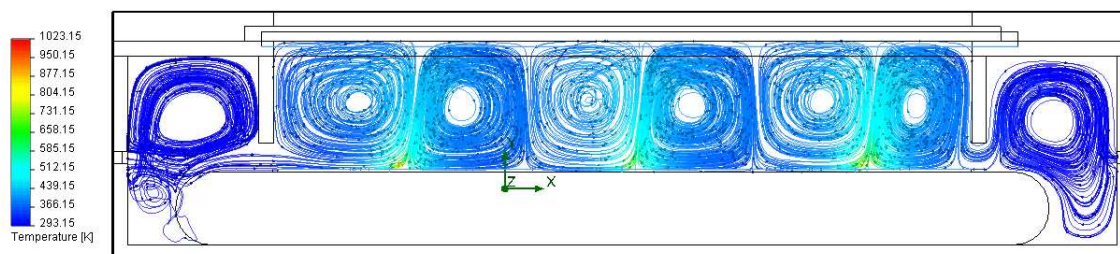


Imagem 5.31 Trajetórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais são isolantes ideais. (vista longitudinal da cavidade do reactor).

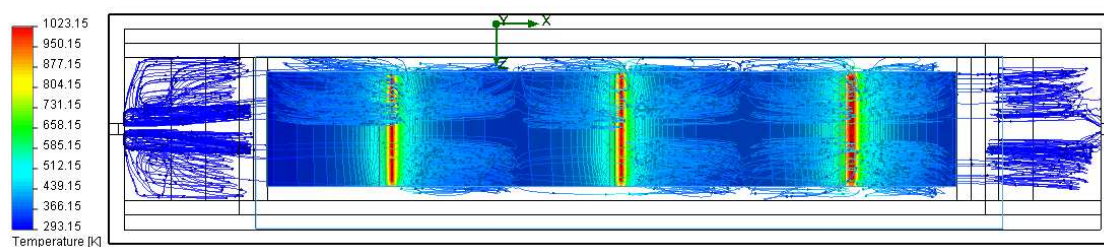


Imagem 5.32 Trajetórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais são isolantes ideais. (vista de topo da cavidade do reactor).

A introdução das placas de confinamento resultou na já esperada interrupção das células de convecção extremas, resultando na criação de duas novas estruturas de convecção junto às zonas quentes esquerda e direita, aparentemente idênticas a todas as outras.

5.2.2.1.3 3ª Simulação

Nesta simulação substituíram-se os materiais ideais por outro passível de ser utilizado experimentalmente no futuro. O material escolhido para constituir as paredes laterais isolantes e as placas de confinamento foi o quartzo fundido. Como já foi referido, este material reúne as melhores condições em minimizar o risco de contaminação do material das pré-fitas, mesmo que do ponto de vista do comportamento térmico esteja longe de poder ser considerado um isolante.

A temperatura inicial atribuída às estruturas de quartzo na simulação foi de 293.15 K.

Resultados

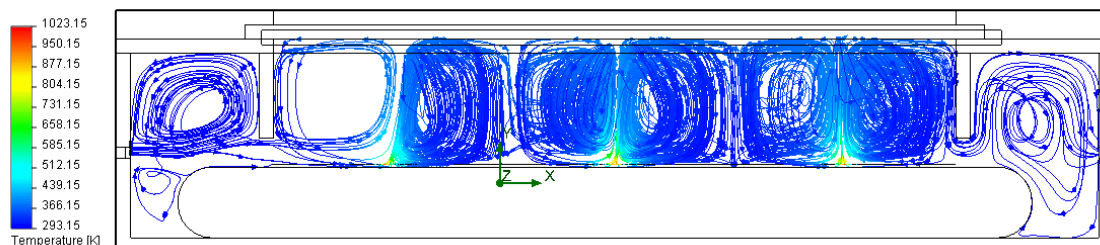


Imagem 5.33 Trajectórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais e as placas de confinamento são de quartzo. (vista longitudinal da cavidade do reactor).

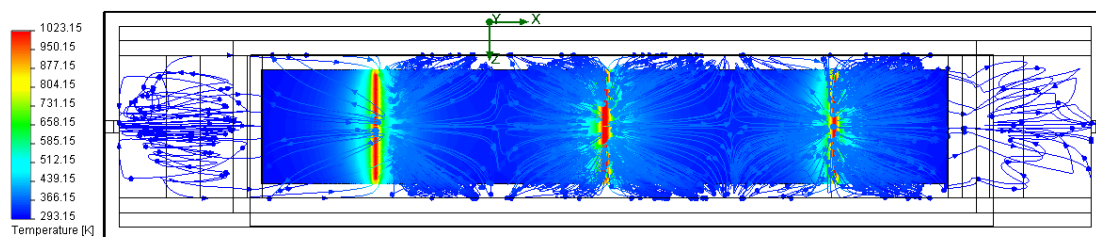


Imagem 5.34 Trajetórias do fluxo de gás dentro da cavidade do reactor em que as paredes laterais e as placas de confinamento são de quartzo. (vista de topo da cavidade do reactor).

Com a substituição do material isolante verificou-se a presença de gradientes térmicos na direcção z que promovem a criação de componentes de força que actuam nas células de convecção nessa direcção, perturbando a formação das estruturas pseudo-cilíndricas verificadas nos casos anteriores. No entanto as formas das estruturas de convecção são idênticas em cada zona quente, o que deve garantir as mesmas distribuições de temperatura em cada zona.

5.2.2.1.4 Comparação das distribuições de temperatura obtidas nas simulações

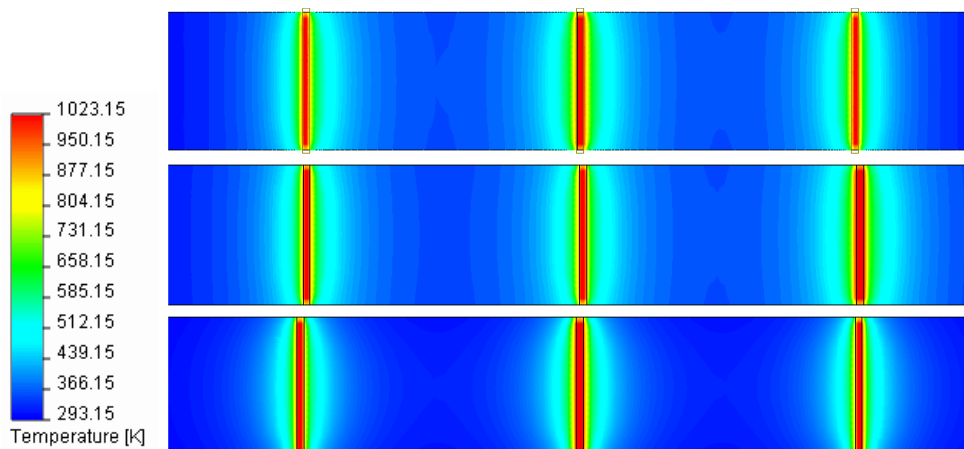


Imagem 5.35 Distribuição da temperatura ao longo da área do substrato relativa à simulação 1, em cima, à simulação 2, ao centro e à simulação 3, em baixo.

As variações na forma das células de convecção verificadas nas simulações, deram origem a distribuições de temperatura ligeiramente diferentes ao longo do substrato como

se constata na Imagem 5.35. Contudo, aparentemente, as zonas de deposição parecem conservar temperaturas homogêneas excepto nos bordos. Este efeito é resultado da transferência de calor por convecção junto a estas zonas. Como se sabe o fluxo de transferência de calor depende do coeficiente h_{cv} , que aqui varia drasticamente com a variação da velocidade do gás sobre as amostra e não como se de uma só superfície aquecida se tratasse. Nos seguintes gráficos mostra-se este comportamento ao longo da secção longitudinal do substrato (em todos ele representou-se a tracejado vermelho, as posições relativas da amostra).

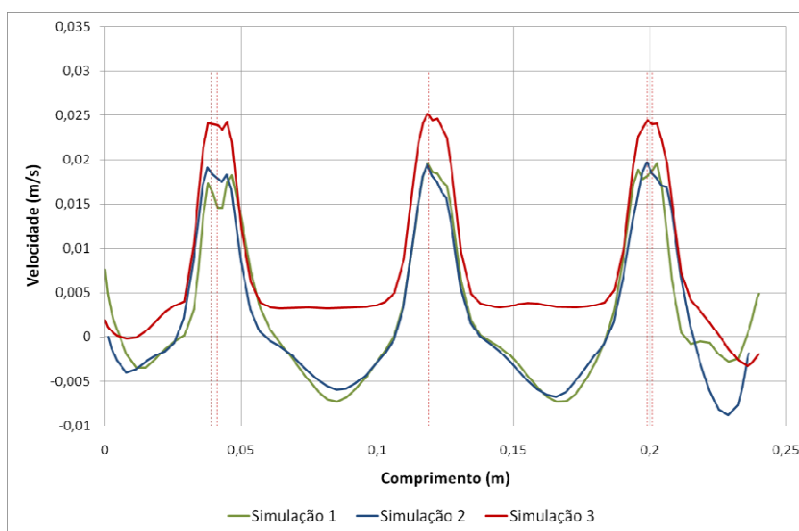


Imagem 5.36 Valores do da componente y da velocidade ao longo da secção longitudinal do substrato

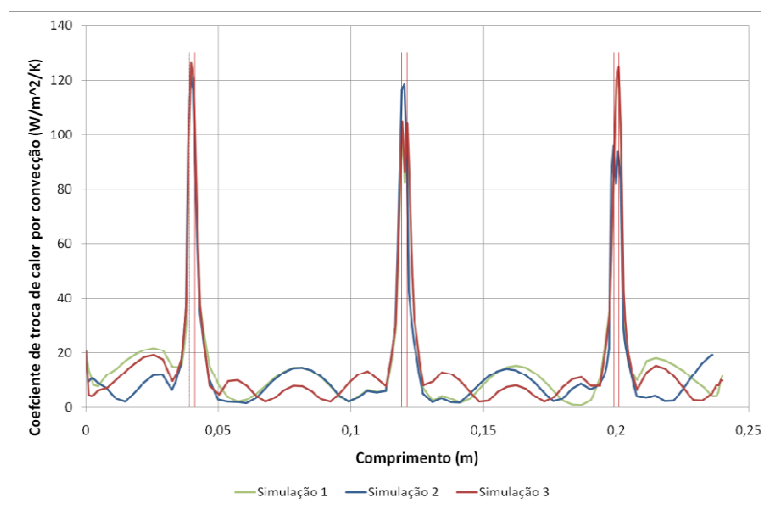


Imagem 5.37 Valores do coeficiente de troca de calor por convecção ao longo da secção longitudinal do substrato.

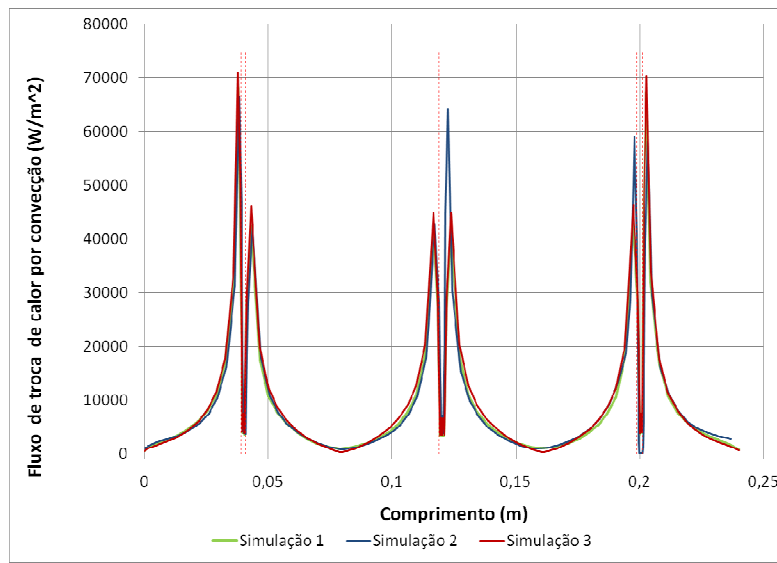


Imagem 5.38 Valores do fluxo de troca de calor por convecção ao longo da secção longitudinal do substrato.

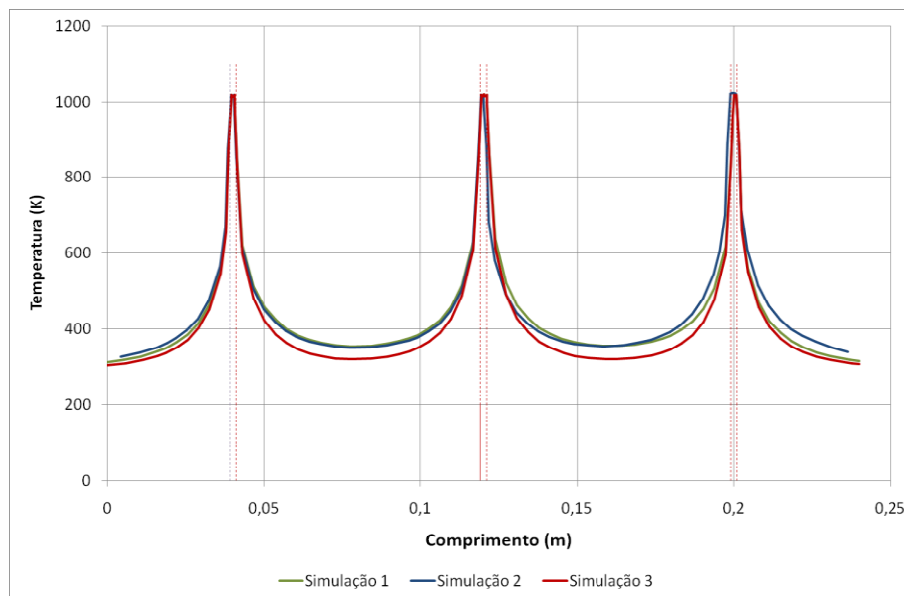


Imagem 5.39 Valores da temperatura ao longo da secção longitudinal do substrato.

Optou-se por mostrar apenas a componente y da velocidade uma vez que sobre as zonas de aquecimento o movimento é sobretudo ascendente. A velocidade do fluido é determinante na definição dos valores do fluxo de troca de calor por convecção, pelo que neste caso esta componente é a principal responsável pelo valor de h_{cv} e portanto pelo arrefecimento das zonas quentes.

Quanto ao arrefecimento dos bordos transversais das zonas quentes, este dá-se pelo mesmo tipo de fenómeno, tal como mostram os gráficos das Imagens 4.41 e 4.42, relativos à zona quente central do substrato na simulação 3.

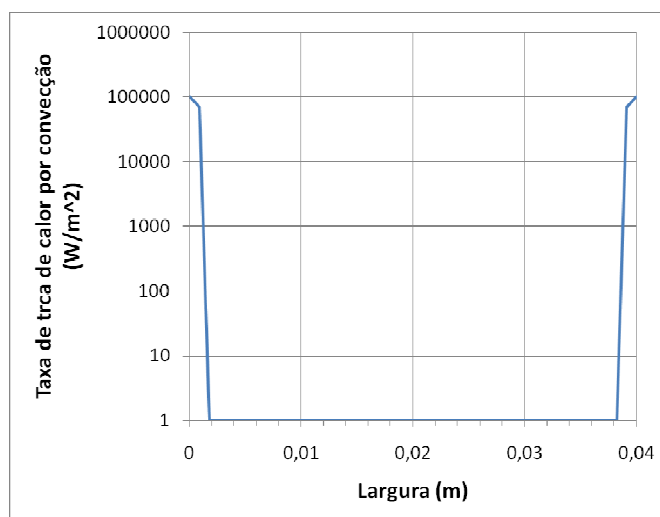


Imagem 5.40 Valores do fluxo de troca de calor por convecção ao longo da secção longitudinal da zona quente central relativa à simulação 3.

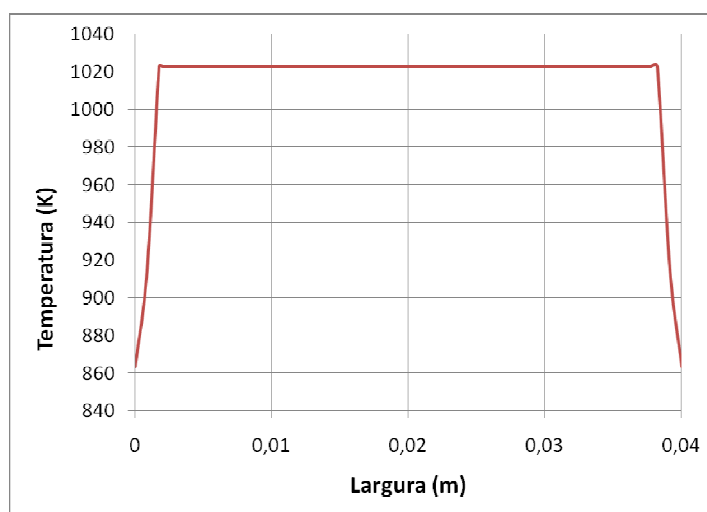


Imagem 5.41 Valores da temperatura ao longo da secção longitudinal da zona quente central relativa à simulação 3.

Dos resultados das simulações efectuadas pode-se concluir que as diferenças na forma como as células de convecção se dispõem em torno das zonas quentes, para taxas de transferência de calor por radiação constantes e suficientes para manter uma temperatura desta magnitude, não condicionam de forma significativa a uniformidade da distribuição da temperatura no substrato. Apenas o arrefecimento dos bordos transversais pode representar um problema quanto à largura da pré-fita, mas como se constata no próximo capítulo, este efeito é minimizado pelo perfil de radiação concentrada no substrato. Contudo no que diz respeito ao transporte de silano para decomposição através de estruturas convectivas desta natureza só se poderá averiguar por monitorização de taxas de deposição por via de experiências num futuro protótipo.

5.3 Análise de espelhos concentradores para o sistema de aquecimento

O principal critério de selecção de fontes de energia adequadas ao reactor SDS de 2ª geração é a capacidade de concentrar radiação com a forma e potência necessária a criar na amostra zonas de deposição com as dimensões pretendidas. A solução encontrada foi um sistema de concentração de radiação constituído por um espelho elíptico e uma lâmpada de de filamento. A opção por sistema surge não só pela capacidade de responder aos requisitos deste reactor e ser um sistema já muito estudado e utilizado em diversas aplicações no laboratório LAFS, como também por representar uma óptima escolha do ponto de vista económico quando comparada com outras soluções como o *laser*. Nesta secção são explorados aspectos como as dimensões, sensibilidade da focagem à posição da lâmpada e adaptação do sistema num reactor com as características já descritas.

5.3.1 Análise de um sistema óptico concentrador de espelho elíptico

Aqui começa-se por apresentar uma síntese de considerações teóricas relativamente à distribuição de intensidade do espelho baseada no trabalho descrito em [12] por J.M.Serra.

Pela geometria do sistema e sua aplicação, a análise da distribuição de intensidade dever ser feita distinguindo as duas direcções do plano focal, que atendendo a à seguinte imagem são a x e y.

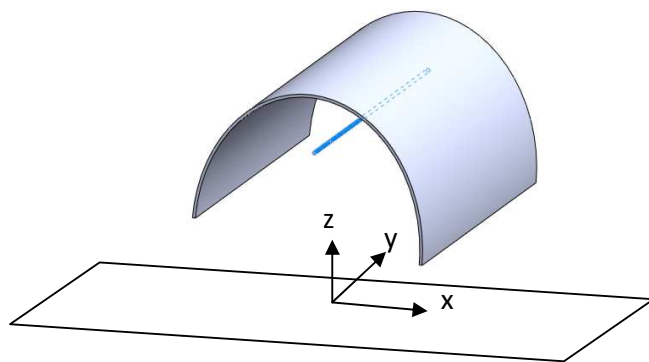


Imagem 5.42 Sistema de coordenadas considerado para a análise do sistema de concentração de radiação.

Na descrição aqui apresentada o filamento foi considerado como um cilindro de comprimento L e raio R , de temperatura uniforme e colocado a uma distância (D), superior ao seu raio.

5.3.1.1 Direcção y

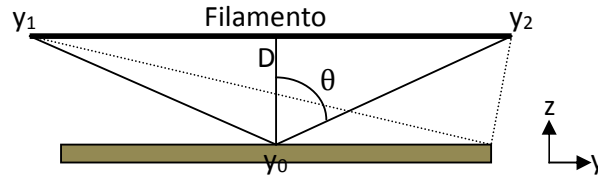


Imagem 5.43 Vista lateral da amostra e filamento, y_1 e y_2 correspondem aos pontos extremos do filamento e y_0 a um ponto da amostra

No diagrama da imagem VIII-9 pode-se observar que a radiação que recebida na amostra no ponto y_0 corresponde ao integral da radiação proveniente de todo o comprimento do filamento. No entanto em qualquer outro ponto da amostra a densidade de energia recebida corresponderá a um valor diferente do recebido em y_0 .

Partindo do caso geral de uma superfície que recebe radiação de um outra, tal como mostra o esquema da Imagem 5.44.

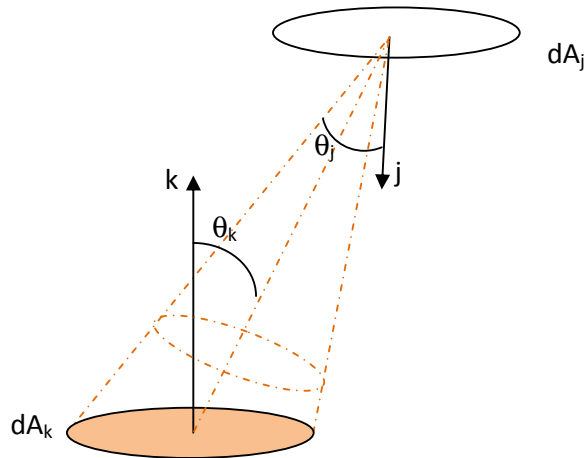


Imagem 5.44 Esquema representativo da radiação recebida numa superfície de área infinitesimal dA_k , emitida por outra de elemento dA_j .

A radiação recebida em dA_j pode ser descrita como:

$$dP = I_0 dA_j \cos \theta_j d\omega \quad (5.2)$$

Em que $d\omega$ corresponde ao ângulo sólido que dA_j vê de dA_k e I_0 é a intensidade de radiação emitida por unidade de área segundo determinada direcção e por unidade de ângulo sólido.

O elemento de ângulo sólido é dado por,

$$d\omega = \frac{dA_K \cos \theta_k}{r^2} \quad (5.3)$$

Pelo que a o total de radiação recebido na superfície de área A_k emitida pela superfície A_j é dada por,

$$P = \int_{A_j} \int_{A_k} \frac{I_0 (\cos \theta)^2}{r^2} dA_j dA_k \quad (5.4)$$

Voltando à situação do filamento, o elemento de área infinitesimal de um cilindro

$$dA_j = 2\pi R dy \quad \text{e} \quad \theta = \tan^{-1} \left(\frac{y-y_0}{D} \right) \quad (5.5)$$

Pode-se então escrever descrever a radiação proveniente de todo o filamento, incidente na amostra por unidade de área por:

$$E = \int_{y_1}^{y_2} 2\pi R I_0 \frac{D^2}{[D^2 + (y - y_0)^2]^2} dy \quad (5.6)$$

Integrando ao longo de todo o filamento, resulta

$$E = \frac{\pi R I_0}{D} \left[\tan^{-1} \left(\frac{y_2 - y_0}{D} \right) - \tan^{-1} \left(\frac{y_1 - y_0}{D} \right) + D \left[\frac{y_2 - y_0}{D^2 + (y_2 - y_0)^2} - \frac{y_1 - y_0}{D^2 + (y_1 - y_0)^2} \right] \right] \quad (5.7)$$

Em que

$$I_0 = \frac{P_{lâmpada}}{4\pi^3 R D} \quad (5.8)$$

Se se considerar que a potência que incide em toda a superfície da lâmpada corresponde ao integral da potência radiada por um filamento (cilindro) de comprimento infinito e raio D .

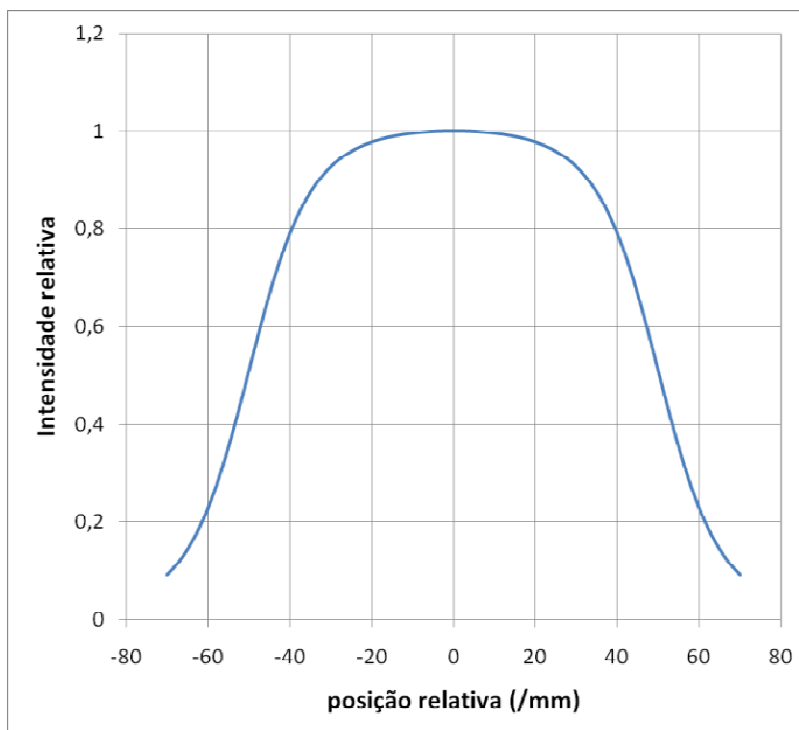


Imagem 5.45 Intensidade relativa de radiação ao longo da direcção y. O filamento encontra-se entre os pontos -50 e 50 das abscissas.

Atendendo ao perfil de intensidade do gráfico da Imagem 5.54, calculado através da equação (5.7), para um filamento de comprimento finito que radia isotropicamente e que se encontra a uma determinada distância de uma superfície, pode-se concluir que mesmo na direcção y a distribuição de intensidade não é uniforme. Só no caso de um filamento de comprimento infinito é que a intensidade segundo y seria constante. A intensidade decresce rapidamente à medida que nos aproximamos dos extremos do filamento, facto a considerar na escolha adequada do comprimento do filamento de modo a corresponder à exigência de radiação uniforme ao longo das zonas quentes da amostra SDS.

5.3.1.2 Direcção x

Segundo esta direcção torna-se relevante descrever a potência global incidente, por unidade de área num ponto da amostra, como a soma de duas componentes: a fracção da radiação directa não reflectida pelo espelho (componente difusa; P_{dif}) e a fracção de radiação reflectida e focada pelo espelho (componente focada; P_{foc}).

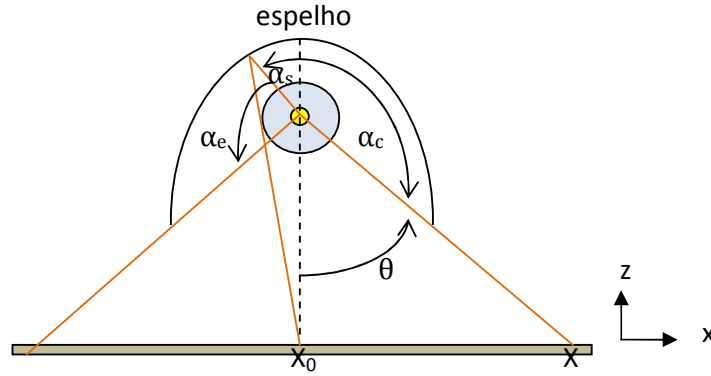


Imagem 5.46 Diagrama da secção transversal do sistema de concentrador de radiação. Estão indicados ,a laranja, raios emitidos pelo filamento.

Assumindo que nesta direcção o filamento da lâmpada possui um comprimento infinito e emite uma potência por unidade de comprimento, por [12], a componente de potência focada tem uma distribuição próxima duma gaussiana.

$$P_{foc}(x) = \frac{P}{\sqrt{2\pi}w_0L} e^{-\frac{x^2}{2w_0^2}} \quad (5.9)$$

Em que w_0 corresponde à distância para a qual a potência se reduz para $1/\sqrt{e}$ do valor máximo, L é o comprimento do filamento e P corresponde à potência total da lâmpada.

Quanto à componente difusa da radiação incidente, esta pode determinar-se a partir da integração da equação (5.7) para um filamento infinito (que corresponde ao primeiro termo do segundo membro da equação (5.10)) e restringindo a emissão a apenas ao plano xz:

$$P_{diff}(x) = \frac{P}{2\pi LD} \frac{1}{1 + \left(\frac{x - x_0}{D}\right)^2} \quad (5.10)$$

As duas componentes contribuem com pesos diferentes para a potência total (por unidade de comprimento), uma vez que factores como a abertura da elipse, o diâmetro dos invólucros das lâmpadas e a distância do filamento à amostra influenciam a intensidade de radiação recebida em cada ponto da amostra. Como se pode observar na Imagem 5.46, a quantidade de radiação focada é afectada por uma região de sombra (associada ao ângulo α_s) e pela quantidade de espelho disponível para reflexões (associada ao ângulo α_c). A radiação difusa é essencialmente afectada por um factor de vista em relação à amostra, que depende do ângulo θ .

Recorrendo novamente à imagem VIII-12 como referência, pode expressar-se a eficiência geométrica de um sistema concentrador elíptico como a razão entre o ângulo efectivo de focagem (α_e) e o ângulo total disponível (α_t):

$$\eta = \frac{\alpha_c - \alpha_s}{\alpha_t} = \frac{\alpha_e}{\alpha_t} \quad (5.11)$$

Assim, é possível estimar a contribuição de cada uma das componentes da potência recebida na amostra, relativamente a factores geométricos.

$$P_{diff} = (1 - \eta) \frac{P}{L} \quad \text{e} \quad P_{foc} = \eta \frac{P}{L} \quad (5.12)$$

No entanto para uma ponderação mais rigorosa há ainda que contabilizar a variação da potência com a distância focal da elipse que tem repercussões significativas no já referido factor de vista. Esta variação afecta principalmente a componente P_{diff} , como se verifica na equação (3.9). E, por sua vez, a P_{foc} depende de uma função de distribuição de radiação concentrada.

5.3.1.2.1 Potência difusa

Começa por se tratar o problema da variação da intensidade da radiação difusa em cada ponto da amostra, devido a um factor de vista, considerando que:

$$P_{diff}(x) = P_{diff\ total} f_{vista}(x) \quad (5.13)$$

Ora sabe-se que

$$P_{diff\ total} = \frac{P\theta}{\pi} \quad (5.14)$$

Pelo que o factor de vista deve satisfazer

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} f_{forma} dx = 1 \quad (5.15)$$

Pelo cálculo do integral, assumindo que o factor de forma tem uma dependência funcional idêntica à equação da P_{diff} mas restringida ao ângulo disponível, θ (Imagem 5.46), obtém-se:

$$f_{forma}(x) = \frac{1}{2\alpha D} \frac{1}{1 + \left(\frac{x - x_0}{D}\right)^2} \quad (5.16)$$

E assim o componente de potência radiada difusa pode escrever-se da seguinte forma:

$$P_{diff}(x) = \frac{P\theta}{\pi} \frac{1}{2\alpha D} \frac{1}{1 + \left(\frac{x - x_0}{D}\right)^2} \quad \text{com } X_{min} < x < X_{max} \quad (5.17)$$

5.3.1.2.2 Potência focada

De forma análoga à anterior, pode escrever-se o termo de P_{foc} , como dependente de uma função de distribuição:

$$P_{foc}(x) = P_{foc\ total} f_{conc}(x) \quad (5.18)$$

$$P_{foc}(x) = P \left(1 - \frac{\alpha}{\pi}\right) r f_{conc}(x) \quad (5.19)$$

Em que r é o coeficiente de reflexão do material de revestimento do espelho e $f_{conc}(x)$ corresponde à função de distribuição da radiação concentrada. Esta função é geralmente assumida como uma gaussiana ou uma função em degrau, ou a convolução das duas, dependendo do raio do filamento. E tal como no caso anterior, o integral da função de distribuição da radiação concentrada deve ser igual a 1.

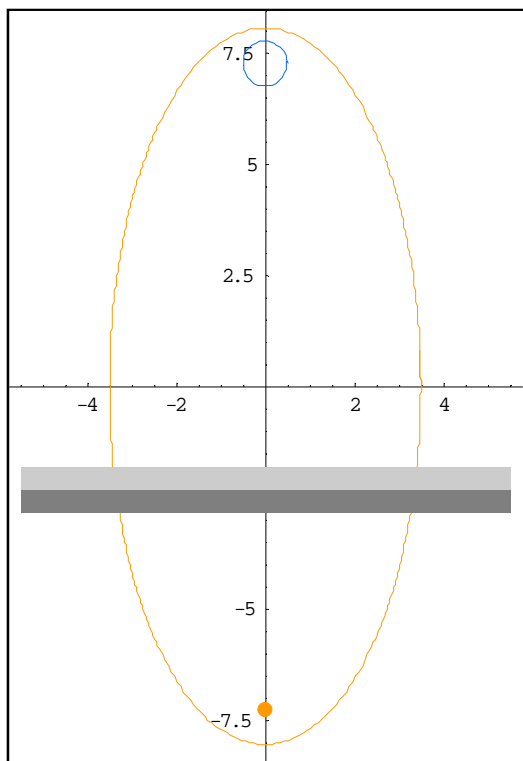
5.3.2 Dimensionamento do espelho elíptico

A escolha da geometria do espelho elíptico para aplicação no reactor SDS de 2ª geração, foi feita procurando satisfazer os requisitos geométricos e os requisitos de distribuição e de valores de intensidade necessários ao estabelecimento do conjunto de zona quentes para deposição CVD.

Atendendo à geometria e dimensões da composição do reactor sugerida na secção do estudo de convecção (5.2), calcularam-se os parâmetros geométricos de uma elipse que satisfizessem as seguintes restrições:

- o semi-eixo deve ser tal que permita a coexistência de três espelho consecutivos de modo a concentrar radiação sobre a amostra em três zonas espaçadas longitudinalmente por 80 mm;
- A distância focal deve permitir que a superfície superior da amostra fique colocada exactamente num dos focos da amostra, sendo o outro foco ocupado pelo filamento radiante.
- A excentricidade da elipse deve garantir que o invólucro de uma lâmpada de 10 mm se mantenha afastado do espelho, pelo menos a 2mm para que estes não se toquem, de modo a evitar possíveis aberrações ópticas na focagem, e trocas de calor por condução que possam deteriorar o próprio material de revestimento do espelho;

A elipse resultante encontra-se representada na seguinte imagem (5.48), e os parâmetros calculados na tabela da Imagem 5.47:



Semi-eixo menor	35 mm
Semi-eixo maior	80.5019 mm
Distância focal	72.5 mm
Excentricidade	0.9006

Imagem 5.47 Parâmetros geométricos da elipse representada na imagem VIII-14.

Imagem 5.48 Elipse calculada segundo as restrições geométricas do reactor SDS de 2ª geração.

Na imagem, representados por faixas de tons cinzentos estão os limites geométricos do reactor, a mais escura representa os 5 mm da janela de quartzo e a mais clara os 5 mm da moldura de alumínio que aperta a janela. Estes limites definem portanto a truncagem da elipse.

Recorrendo à definição de eficiência geométrica e através da equação (3.10) determinou-se, para esta elipse, $\eta = 69\%$ (com $\alpha_c = 159.5^\circ$, $\alpha_s = 35.5^\circ$ e $\alpha_t = 180^\circ$). Isto significa que se dispõe de 69% da radiação que estaria disponível com outros parâmetros geométricos do conjunto elipse/lâmpada.

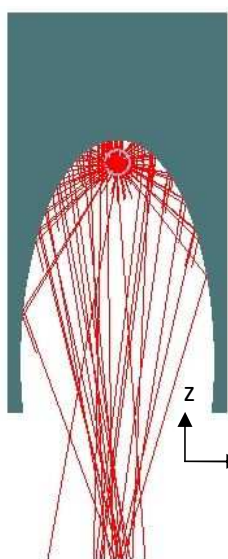
Quanto ao comprimento do espelho, optou-se por 80 mm, usando apenas como critério a sua adequação à largura do reactor, que servirá de suporte aos três espelhos. Para a fonte luminosa foram escolhidas lâmpadas disponíveis no mercado, de filamento com um raio de 1.2 mm e 100 mm de comprimento, com um invólucro de quartzo com um diâmetro igual a 10 mm. A distribuição da intensidade ao longo da direcção y, neste caso, não dependerá apenas do comprimento do espelho ou da lâmpada, uma vez que a largura da janela disponível na tampa do reactor também a condicionará. A análise de distribuição da intensidade, ao longo da direcção y e também ao longo da direcção x, são apresentadas mais à frente.

5.3.2.1 Análise de desvios do filamento em relação ao foco de emissão do espelho

Os desvios do filamento em relação ao foco de emissão do espelho elíptico são uma importante fonte de erro neste tipo de sistema. Qualquer variação milimétrica do filamento no plano XZ tem repercussões na qualidade da focagem e portanto nos níveis de intensidade atingidos.

Para este estudo recorreu-se à ferramenta de simulação *ray-trace*, ZEMAX.

Para além das dimensões do espelho e lâmpadas já referidas anteriormente, as simulações foram efectuadas de acordo com a seguinte parametrização:



- Material do espelho: alumínio de coeficiente de reflexão igual a 0.8;
- Material do invólucro da lâmpada: quartzo;
- Espessura dos invólucros: 1 mm;
- Nº de raios utilizados na simulação: 1×10^6 .
- Amostra: alvo de 80 mm x 80 mm, 100% absorsor.

Imagem 5.49 representação do espelho seleccionado na análise de *ray-tracing*.

Foi feita uma simulação, para referência, em que o filamento foi perfeitamente sobreposto ao foco de emissão do espelho. No estudo da direcção x, estudaram-se deslocações milimétricas do filamento apenas no sentido negativo (considerando a origem no foco do elipsóide) atendendo à simetria existente segundo esta direcção). Na direcção z, fez-se variar milimetricamente o filamento em ambos os sentidos, em relação ao foco. O alvo que representa a amostra foi colocado no plano xy onde se intersecta com o segundo foco do elipsóide.

5.3.2.1.1 Resultado no foco $(x,z) = (0,0)$

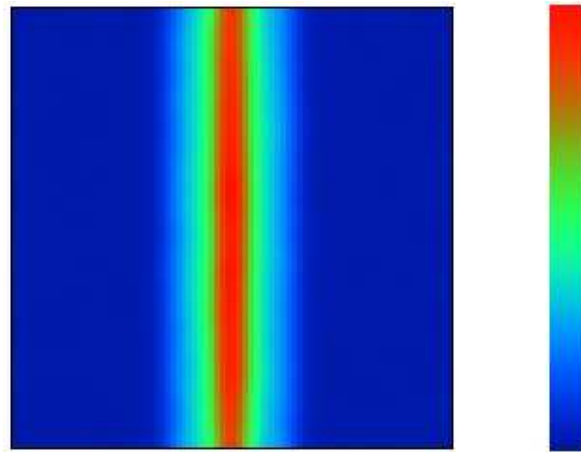


Imagem 5.50 Distribuição intensidade da radiação no plano da mostra num alvo de 80 mm x 80 mm. A escala é normalizada de acordo com o sistema de cores RGB.

5.3.2.1.2 Resultados dos desvios na direcção x

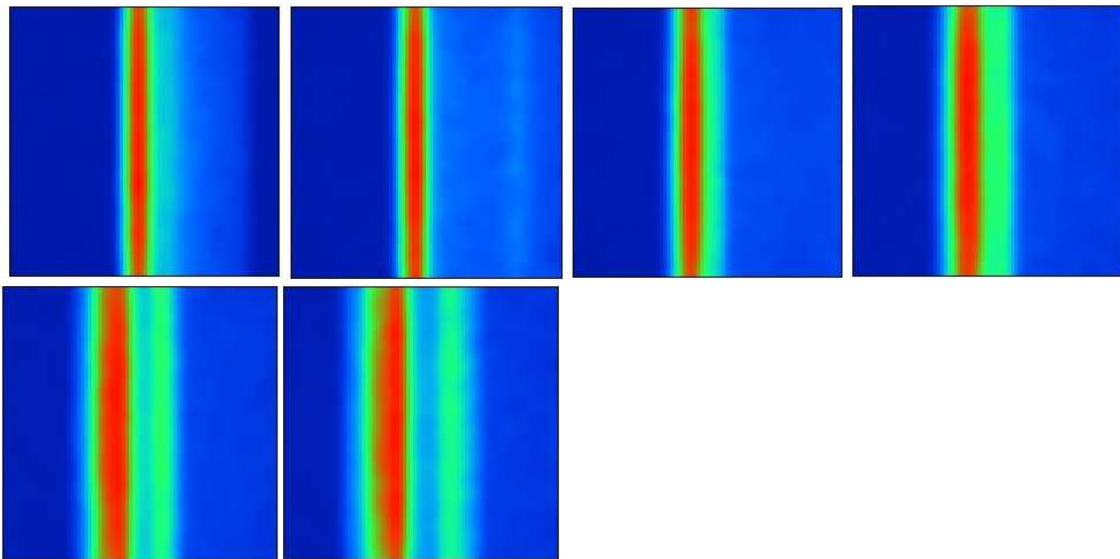


Imagem 5.51 Mapas de distribuição da intensidade de radiação correspondentes a deslocamentos do filamento segundo x no sentido negativo (no sentido esquerda-direita, deslocações de 1 a 6 mm).

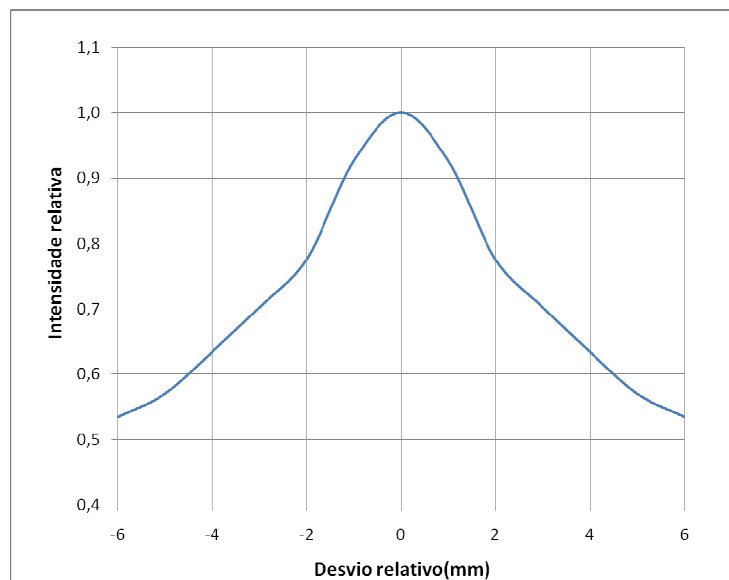


Imagem 5.52 Variação dos picos de intensidade máxima relativamente a deslocações do filamento em x.

Na Imagem 5.51 mostra-se que com a variação da posição do filamento segundo x, se continua a ter uma zona de maior concentração de radiação mas de intensidade inferior, que varia de acordo com o perfil do gráfico da Imagem 5.52. No sentido oposto ao do desvio do filamento observa-se, na região do alvo adjacente à zona de maior concentração, um espalhamento da radiação que para os maiores desvios chega a representar um destacamento e afastamento de uma faixa concentrada de fraca intensidade.

5.3.2.1.3 Resultados dos desvios na direcção z

Na análise segundo esta direcção simularam-se deslocações até 3 mm no sentido positivo, por limitação geométrica, e até 6 mm no sentido negativo.

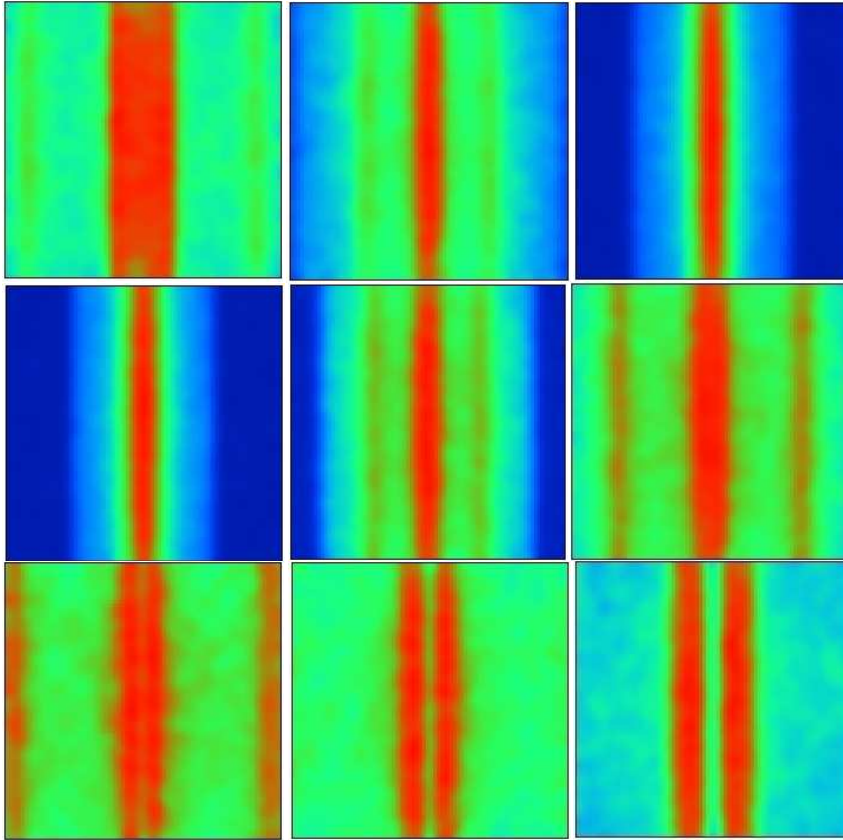


Imagem 5.53 Mapas de distribuição de radiação por unidade de área, correspondentes a deslocamentos do filamento segundo z. No sentido esquerda-direita, as imagens correspondem a deslocações milimétricas que vão de 3 a 1, nas primeiras três, e de -1 a -6 mm, nas restantes.

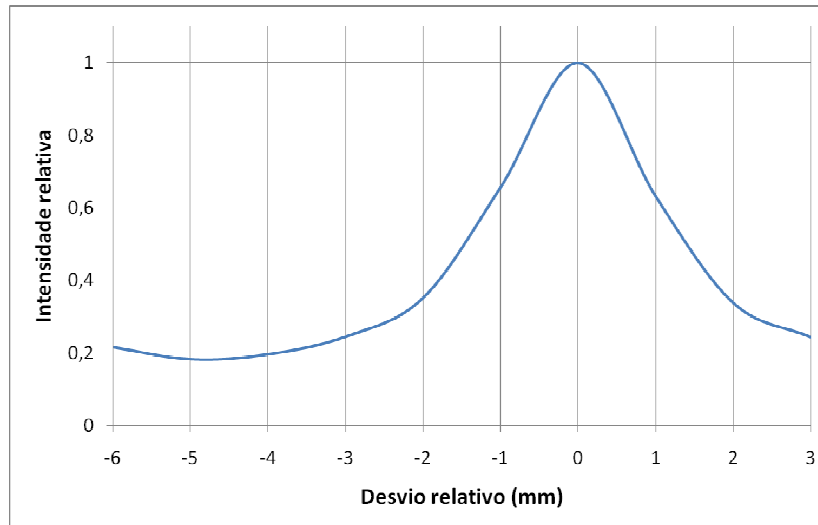


Imagem 5.54 Variação dos picos de intensidade máxima relativamente a deslocações do filamento em z.

Pela observação do perfil de variação da intensidade máxima com o desvio do filamento ao longo da direcção z (Imagem 5.54), verifica-se que esta decresce de forma mais acentuada do que acontece com os afastamentos em x. Este facto surge como consequência da forma como a radiação é distribuída ao longo do plano da amostra em cada desvio, tal como se constata nos mapas da Imagem 5.53. Grande parte da radiação passa a ser distribuída e concentrada em bandas simétricas em relação ao centro do alvo, e não apenas ao longo de meia área da amostra, como acontece na situação anterior.

5.3.3 Integração do sistema concentrador de radiação no reactor

Integrou-se o espelho no reactor dimensionado no capítulo anterior, e com o auxílio do simulador *ZEMAX* analisou-se a distribuição da intensidade luminosa na área de amostra pretendida.

Na imagem que se segue mostra-se de que forma os espelhos foram acoplados ao reactor. A sequência dos três espelhos está disposta de modo a que os filamentos das lâmpadas fiquem perfeitamente alinhados com as zonas onde se pretende que ocorra deposição de silício e portanto onde a radiação deve ser concentrada. A distância entre os filamentos e o plano amostra, corresponde exactamente a duas vezes a distância focal da elipse do espelho, garantindo que os dois elementos ocupem respectivamente o foco de emissão e o foco de recepção.

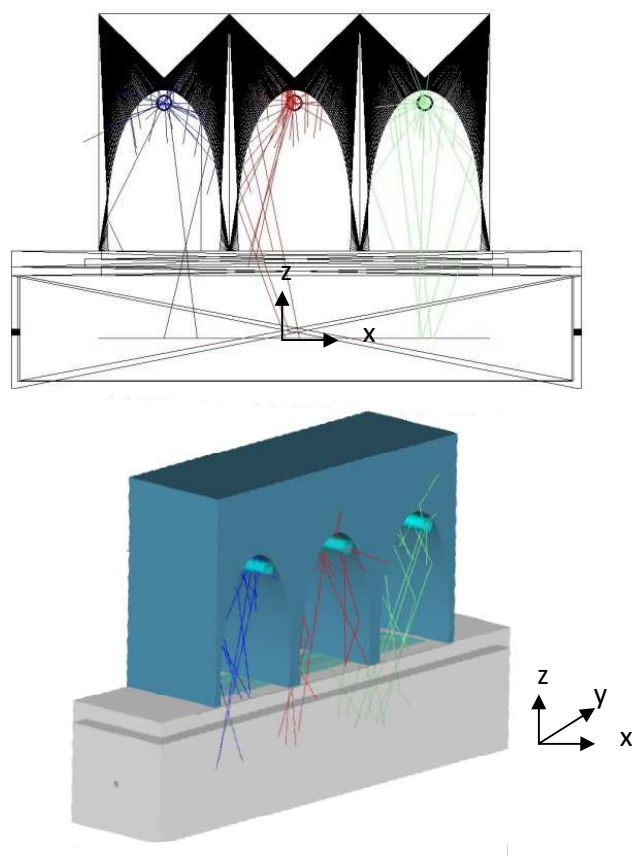


Imagem 5.55 Representação da integração dos sistemas de iluminação (espelho e filamento) no reactor para simulação *ray-tracing*. Perfil longitudinal, em cima, e vista isométrica em baixo.

5.3.3.1 Simulação

Os parâmetros de simulação adoptados para esta simulação foram:

- Material dos espelhos: alumínio de coeficiente de reflexão igual a 0.8;
- Material do corpo e tampa do reactor: alumínio de coeficiente de reflexão igual a 0.8;
- Material da tampa, placas adjacentes às paredes laterais e placas do reactor: quartzo;
- Material do invólucro da lâmpada: quartzo;
- Espessura dos invólucros: 1 mm;
- Comprimento das lâmpadas: 100 mm;
- Amostra: alvo de 240 mm x 40 mm, 100% absorber;
- Número de raios emitidos por cada filamento: 1×10^6 .

Na simulação não se incluíram as placas verticais de quartzo que foram usadas para condicionar a formação das células de convecção extremas, uma vez que a sua orientação é paralela ao eixo de concentração dos espelhos, pelo que a sua presença apenas influenciaria por efeito de refração uma pequena percentagem de radiação difusa que atingiria o alvo fora das zonas de interesse.

5.3.3.1.1 Resultados

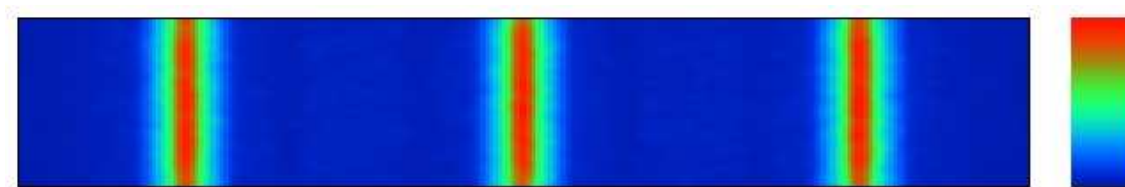


Imagem 5.56 Mapa de distribuição da radiação no plano da amostra. A escala de intensidade relativa encontra-se normalizada no sistema RGB.

Em primeira análise constatou-se, tal como esperado, que todas as regiões da amostra sujeitas à concentração de radiação apresentam distribuições de intensidades semelhantes entre si, em ambas as direcções.

No gráfico da Imagem 5.57 observa-se que o perfil da distribuição de intensidade nas zonas de concentração segundo a direcção y , apresenta valores de intensidade superiores nos bordos, e tende a decrescer em direcção ao centro, onde se observa uma ligeira subida. Este resultado está completamente em desacordo com o previsto pela curva teórica, calculada através da equação (5.7) para uma situação sem reactor, o que evidencia que a estrutura do reactor influencia a forma como a radiação é concentrada na amostra. Mais à frente mostram-se resultados de outras simulações que permitem tirar conclusões acerca deste perfil. Apesar da semelhança, existem ligeiras diferenças a nível de intensidades encontradas entre as três zonas de concentração de radiação, que advém do facto de na simulação a emissão de raios pelo filamento ser feita em direcções aleatórias (emissão isotrópica) a partir de cada ponto mas em mesmo número, o que não garante uniformidade na emissão de radiação simulada. Embora não estejam aqui apresentadas, estas pequenas variações ocorreram também entre simulações diferentes nas mesmas zonas relativas.

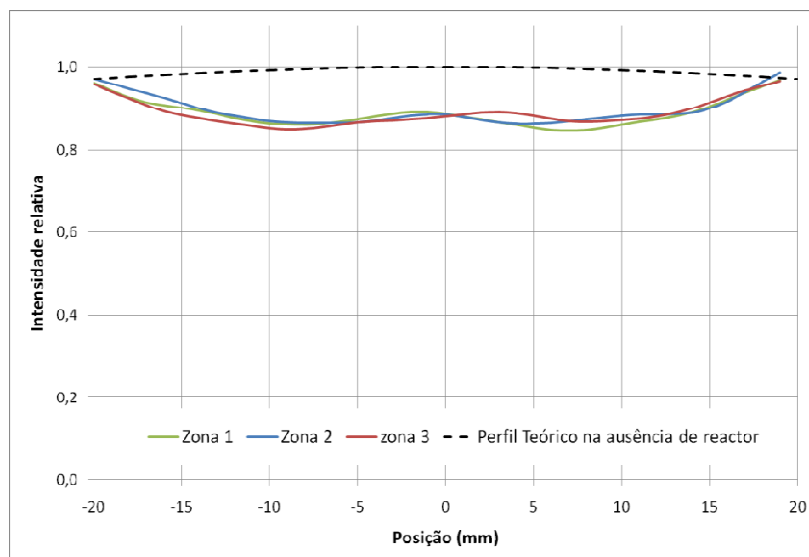


Imagem 5.57 Valores obtidos por simulação (linhas a cheio) e teóricos (linha a tracejado) para a distribuição de intensidade relativa na amostra segundo a direcção y.

A distribuição da radiação ao longo do centro longitudinal da amostra (Imagem 5.58), mostra também que a geometria do reactor não induz diferenças significativas entre as zonas de concentração. O *fit* teórico feito à distribuição de intensidade da zona central é satisfatório, no entanto, as diferenças que se observam na base dos dois perfis revelam que factores não considerados no modelo teórico assumem aqui um papel significativo na distribuição da radiação. O modelo teórico descreve apenas a situação de emissão de um filamento cilíndrico que emite apenas no plano que intercepta perpendicularmente. Nas simulações a emissão é isotrópica (como já referido), pelo que a distribuição feita pelo espelho tanto de radiação difusa e principalmente da concentrada torna-se mais complexa. O perfil teórico da Imagem 5.58 foi calculado a partir das expressões (5.9) e (5.10). As duas parcelas, referentes à radiação difusa e focada, foram somadas ponderadamente de acordo com o critério de ponderação das equações (5.12). A razão entre o integral das duas componentes obtido foi de 0,166. Através desta ponderação foram feitos ajustes na parcela de radiação difusa. Para calcular a componente de radiação directa, estimou-se o valor da largura das gaussianas ($2\omega_0$) da distribuição obtida (que corresponde à distância para a qual a intensidade se reduz a $1/e$ do valor máximo) em 8,5.

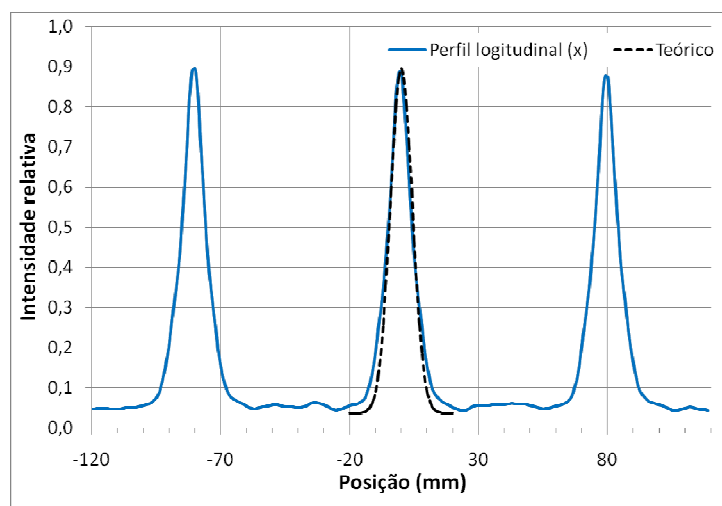


Imagem 5.58 Valores obtidos por simulação (a cheio) na amostra e teóricos (a tracejado) para a zona central, relativos à distribuição de intensidade relativa ao longo do centro longitudinal segundo a direcção x.

De regresso aos resultados relativos à distribuição de intensidade segundo y, considerou-se que o encurvamento do perfil junto aos bordos da amostra pode representar uma característica positiva quanto ao objectivo de se criarem zonas sobre a amostra que recebem potências por unidade de área uniformes. Para sustentar esta ideia relembram-se os resultados obtidos no capítulo anterior que, apesar de não poderem ser considerados de forma quantitativa, mostram (Imagem 5.40 e 5.41) que os bordos da amostra junto às zonas aquecidas são arrefecidos por convecção o que pode a equilibrar a taxa de transferência de calor nesses locais, uniformizando a temperatura ao longo das zonas quentes. Com o objectivo de compreender a que nível a estrutura do reactor influencia a distribuição de radiação por unidade de área segundo esta direcção, procedeu-se a uma nova série de simulações e análises teóricas.

5.3.3.1.2 Condicionamento da reflexão dos componentes de alumínio

Nesta simulação, alterou-se apenas o material de revestimento da tampa e do corpo do reactor, para um material ideal de coeficiente de absorção e reflexão radiativa igual a 1 e 0, respectivamente.

5.3.3.1.2.1 Resultados

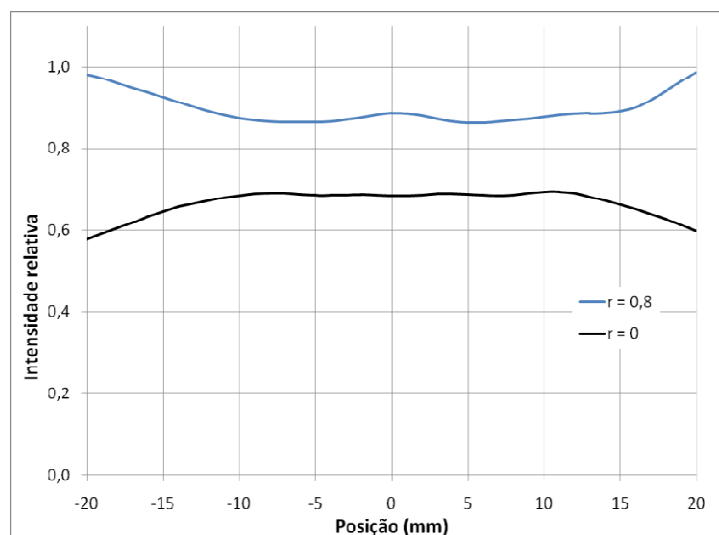


Imagem 5.59 Valores obtidos para a distribuição de intensidade relativa no centro da zona de concentração de radiação central segundo a direcção y , com reflectividade da tampa e corpo do reactor nula (a azul) e igual a 0,8 (correspondente ao revestimento de alumínio – a preto).

O resultado da simulação mostra que as reflexões da radiação que ocorrem tanto na tampa do reactor como nas suas paredes internas, não só são responsáveis pelo encurvamento dos níveis de intensidade de radiação que chega à amostra nos bordos das zonas de concentração, como também são responsáveis pelo aumento generalizado da intensidade ao longo de todo o perfil. A comparação dos dois perfis mostra ainda que reduzindo a reflectividade dos componentes do reflector, a bossa central da distribuição desaparece e os bordos passam a encurvar suavemente para intensidades inferiores.

Na tentativa de dissecar as causas destes efeitos explorou-se de que forma a geometria do reactor influencia a distribuição de intensidades na amostra.

5.3.3.1.3 Influência da geometria do reactor

Toda a cavidade interna do reactor representa uma fonte de reflexões, refrações e dispersões de radiação que influenciam a forma como a radiação difusa é recebida na amostra. Associados a estes efeitos estão também os componentes que estabelecem a fronteira entre o interior do reactor e exterior, a tampa e a janela.

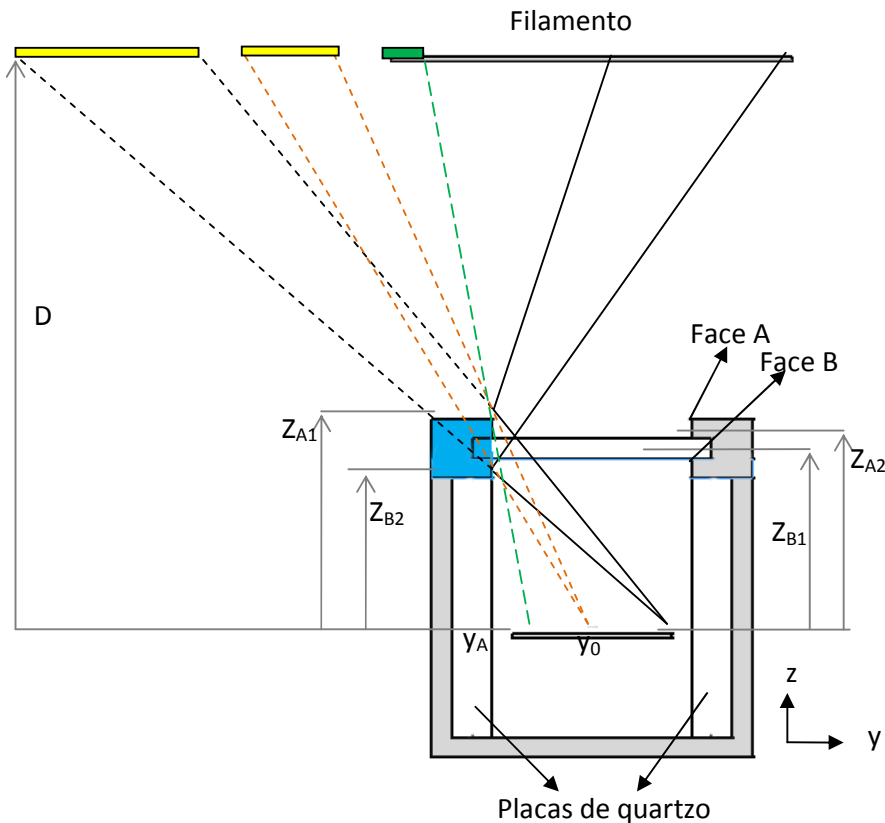


Imagem 5.60 Diagrama de raios na amostra (corte transversal) provenientes de reflexões nas superfícies verticais da moldura da tampa do reactor. Os troços amarelos representam as projecções, da superfície a partir de dois pontos distintos da amostra, que constituem novos troços de filamento. A verde está representado um troço de filamento cuja radiação emitida não é recebida na zona obstruída pela presença da tampa do reactor. Em cada superfície vertical da moldura da tampa do reactor existem na realidade duas (superfícies) com 5 mm de altura interrompidas por 5 mm do encaixe da janela de quartzo.

O diagrama da Imagem 5.60 mostra como o conjunto que constitui a tampa do reactor influencia a forma como a radiação é distribuída ao longo da amostra, segundo a direcção y . Apesar de na janela de quartzo existir refacção, este fenómeno será desprezado com vista a simplificar esta análise.

Na referida imagem estão representados dois tipos de fenómenos que afectam a distribuição da radiação na amostra, que têm origem na geometria da tampa. Estes fenómenos são a obstrução, representada pela trajectória a verde, e a reflexão, representada pelos

raios a preto e laranja. As reflexões, promovidas pelos perfis de alumínio da tampa em cada ponto da amostra, têm como consequência o aumento da intensidade de radiação nesse ponto em quantidade idêntica à que seria recebida por um outro filamento de dimensões e localização correspondentes às da projecção, na linha do filamento da lâmpada, da superfície reflectora. As obstruções funcionam de forma idêntica e inibem o alcance da radiação a determinado ponto da amostra, desde que a projecção da superfície obstrutiva na linha do filamento se sobreponha ao filamento (tracejado verde).

Recorrendo à análise da distribuição de intensidade segundo a direcção y , apresentada no início do capítulo, pode concluir-se que a radiação total incidente por unidade de área (equação (5.7)) em cada ponto da amostra, é igual ao resultado da soma do integral da radiação emitida pelo filamento cilíndrico e dos integrais relativos à emissão dos troços de filamento projectados, menos o total de radiação obstruída.

Considerando que o centro do referencial é o centro da amostra, representado na figura por y_0 , a radiação total incidente em cada ponto na amostra por unidade de área é dada por:

$$E_T(y_0) = E_{Filamento}(y_0) + E_{T_projecções}(y_0) - E_{Tobstruída}(y_0) \quad (5.20)$$

Em que

$$E_{Filamento}(y_0) = \int_{y_1}^{y_2} 2\pi R I_0 \frac{D^2}{[D^2 + (y - y_0)^2]^2} dy \quad (5.21)$$

Com y_1 e y_2 correspondentes às componentes segundo y , das coordenadas dos extremos do filamento.

A radiação por unidade de área acumulada em cada ponto devido às quatro superfícies reflectoras pode ser descrita como:

$$E_{T_projecções}(y_0) = \sum_{i=1}^4 \int_{y_{inicial}}^{y_{final}} 2\pi R r I_0 \frac{D^2}{[D^2 + (y - y_0)^2]^2} dy \quad (5.22)$$

Em que r é o coeficiente de reflexão das superfícies e y_{final} e $y_{inicial}$ correspondem às componentes segundo y das coordenadas dos troços de filamento projectados. Estas foram calculadas de acordo com as seguintes expressões:

$$y_{inicial} = y_0 \pm \frac{D}{Z_1} \sqrt{(y_A - y_0)^2} \quad \text{e} \quad y_{final} = y_0 \pm \frac{D}{Z_2} \sqrt{(y_A - y_0)^2} \quad (5.23)$$

("+ "se as superfícies reflectoras estiverem no lado direito relativamente ao centro da amostra e "-" se estiverem no lado esquerdo)

As quantidades Z_1 e Z_2 correspondem às coordenadas segundo z dos pontos de maior ou menor altura, respectivamente, de cada superfície reflectora. E y_A corresponde ao valor da distância entre o centro da amostra e a coordenada y das superfícies reflectoras da tampa do lado esquerdo.

Por fim, a radiação total por unidade de área obstruída pela tampa do reactor pode ser descrita da seguinte forma:

$$E_{Tobstruída}(y_0) = \int_{y_1}^{y_{inicial}} 2\pi R I_0 \frac{D^2}{[D^2 + (y - y_0)^2]^2} + \int_{y_{inicial}}^{y_2} 2\pi R I_0 \frac{D^2}{[D^2 + (y - y_0)^2]^2} \quad (5.24)$$

Válido para $y_{inicial} \geq y_1$ e $y_{inicial} \leq y_2$. O primeiro termo do segundo membro é refere-se às obstruções que ocorrem no lado esquerdo, e o segundo, às do lado direito.

Estas considerações são suficientes para perceber o que está na base dos resultados das simulações, relativos à distribuição da radiação incidente ao longo de y . Apesar de não se ter analisado, de um ponto de vista teórico, o que acontece à radiação refractada e reflectida pelas paredes internas do reactor, o seu efeito, no perfil de distribuição de radiação, pode ser estimado por via de comparação entre os resultados teóricos para a tampa do reactor e novas simulações.

5.3.3.1.4 Efeito das obstruções

Retomando à simulação anterior, no caso em que se anulou a reflectividade de todo o corpo do reactor, é possível agora afirmar que a queda de intensidades da radiação incidente nos bordos da amostra se deve à sombra provocada pela superfície horizontal da tampa do reactor. No gráfico seguinte (Imagem 5.61) mostra-se que o perfil previsto teoricamente para a situação em que a radiação é apenas afectada por obstrução, é extremamente semelhante ao da simulação, com a excepção de que, apesar das rampas de intensidade apresentarem declives idênticos, os valores calculados são ligeiramente menores e as descidas começam mais cedo. Mais uma vez apresenta-se o tipo de emissão de radiação isotrópica em cada ponto do filamento, nas simulações, como principal causa das diferenças verificadas.

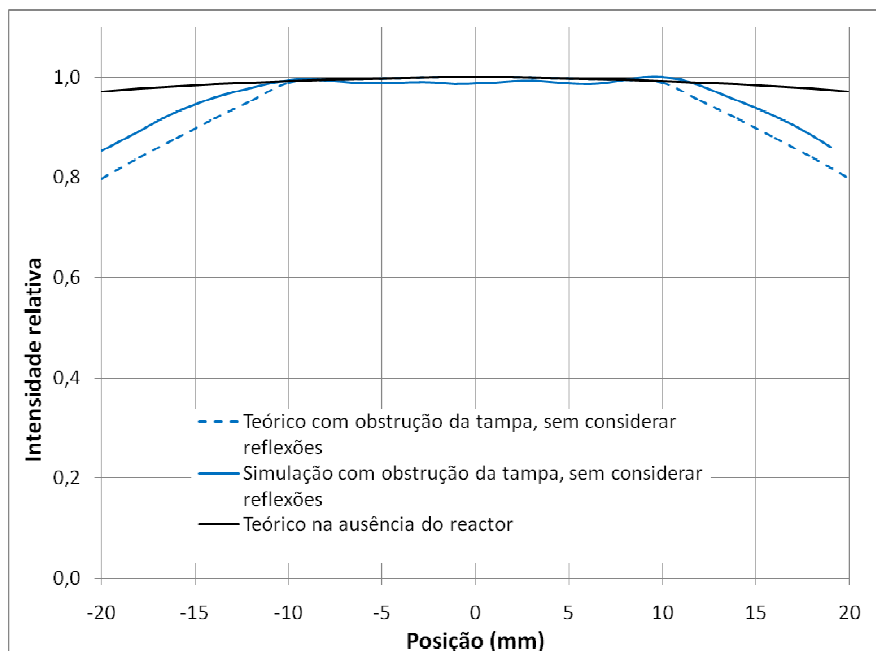


Imagem 5.61 Valores de intensidade relativa de radiação relativos ao centro da amostra ao longo da direcção y, obtidos por simulação e modelos teóricos para condições diferentes de reflectividade das paredes do reactor e obstrução da radiação pelo próprio reactor(no gráfico usava na legenda: preto---Teórico sem obstruções).

5.3.3.1.5 Influência das reflexões

Falta agora tirar conclusões acerca do efeito das reflexões nas superfícies verticais da abertura da tampa do reactor.

Foi feita uma nova simulação em que se alterou o material das placas laterais de quartzo por um ideal com o coeficiente de absorção óptica igual a 1, de modo a que nenhuma radiação sofra refrações e posteriormente reflexões nas paredes de alumínio antes de atingir a amostra. O resultado obtido encontra-se no gráfico da Imagem 5.62, junto do perfil teórico calculado para condições idênticas, em que se consideraram as reflexões das superfícies verticais da tampa de alumínio e a sombra promovida pela componente horizontal da mesma.

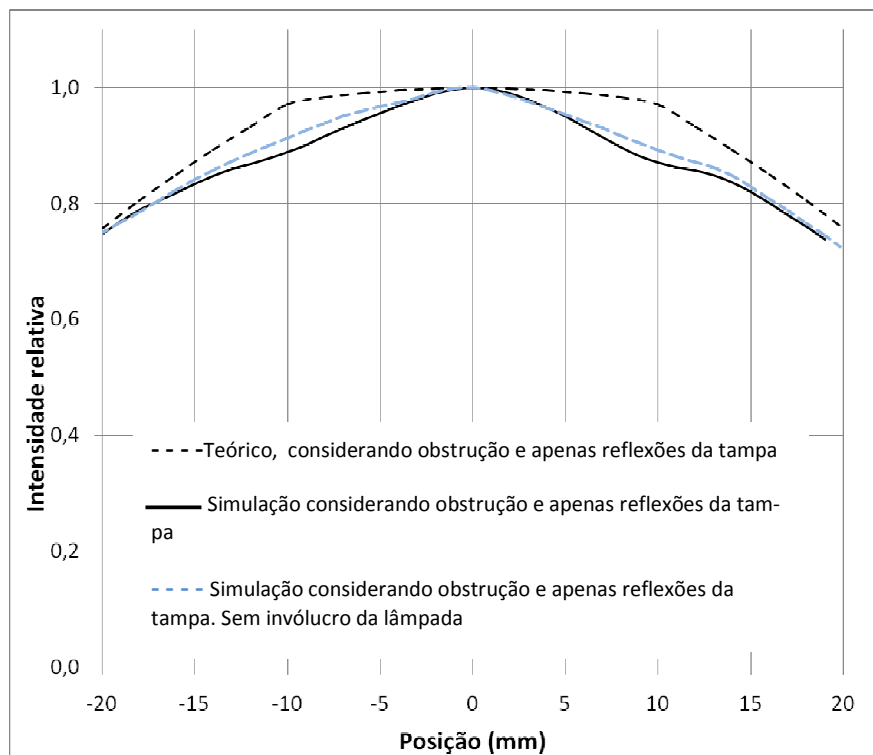


Imagem 5.62 Valores de intensidade relativa de radiação incidente, no centro da amostra ao longo da direcção y, obtidos por simulação e modelos teóricos para condições diferentes de reflectividade das paredes do reactor e obstrução da radiação pelo próprio reactor.

O perfil teórico não corresponde satisfatoriamente ao da simulação. Atendendo ao facto de as distribuições apresentadas não se poderem relativizar devido às diferenças da natureza da emissão considerada em cada método, não se pode concluir com rigor acerca dos níveis de intensidade. No entanto, através da comparação com os perfis apresentados no gráfico (Imagem 5.62), pode afirmar-se que as reflexões são a explicação da existência da bossa central da distribuição obtida por simulação, que por sua vez se torna mais suave quando não se incluiu o invólucro de quartzo da lâmpada (linha azul tracejada). Contudo, o efeito da sombra da tampa é também evidente nesta situação, o que justifica a conclusão de que as reflexões nas superfícies verticais não são responsáveis por mascarar o efeito da sombra e até o inverter na situação original do problema. No seguinte gráfico torna-se a mostrar o resultado obtido na simulação original, sem restrições, juntamente com o desta simulação.

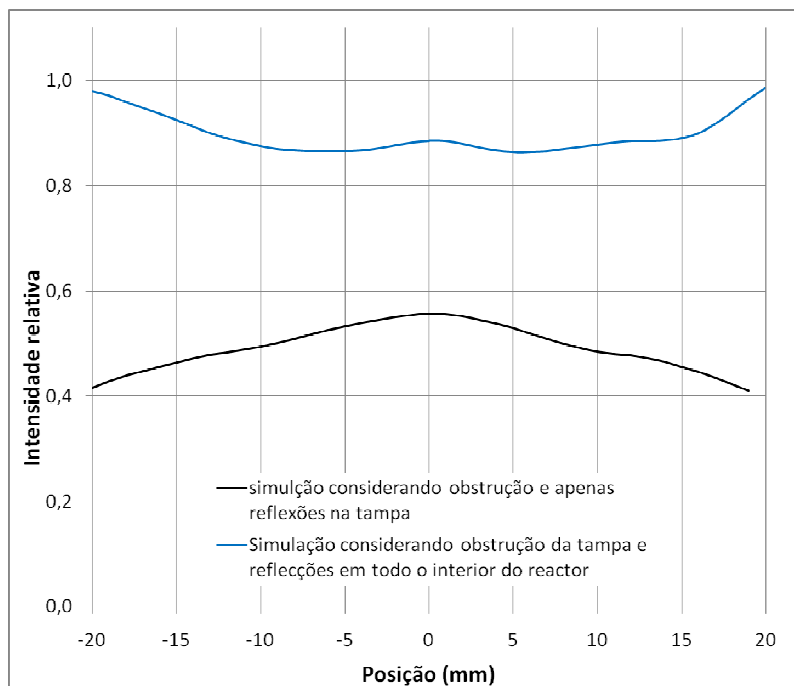


Imagem 5.63 Valores de intensidade relativa de radiação incidente no centro da amostra ao longo da direcção y, obtidos por simulação.

Assim, por exclusão, deve concluir-se que o perfil de distribuição de radiação incidente obtido sem qualquer restrição é resultado das refacções e reflexões que ocorrem nas placas laterais de quartzo e paredes internas do reactor, tal como também sugere a seguinte imagem.

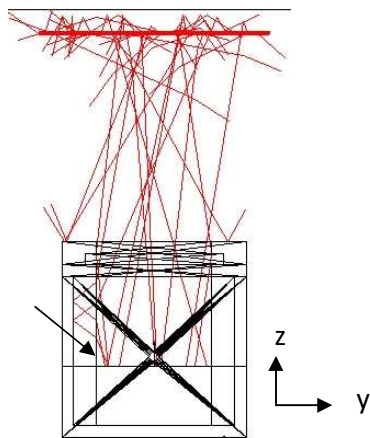


Imagem 5.64 Vista lateral de uma simulação óptica executada em *Zemax*.

6 Conclusões

Os estudos decorridos nesta dissertação permitiram de um modo geral, compreender melhor os resultados nem sempre satisfatórios do reactor *SDS* de 1ª geração e desenvolver novas ideias para um novo reactor, que se acredita vir a impulsionar a tecnologia de crescimento de fitas de silício, *SDS Ribbons*, a um lugar de destaque no mercado de fornecimento de silício cristalino de elevada qualidade para produção de células fotovoltaicas.

Na primeira parte, dedicada ao estudo do reactor *SDS* de 1ª geração, constatou-se a viabilidade do uso dos programas de simulação seleccionados para análises de distribuição radiativa e dinâmica de fluidos. Os resultados das simulações de *ray-tracing*, executadas em *ZEMAX* no âmbito da caracterização da distribuição da radiação na amostra, mostraram-se altamente correlacionados com os medidos experimentalmente. Com resultados bastantes satisfatórios, conseguiu-se também simular, através do *FloWorks*, a dinâmica do gás durante o processo CVD, no interior do reactor. Estes mostraram de forma evidente, a correlação entre a convecção natural no interior do reactor e a distribuição de temperaturas ao longo da amostra, com os perfis de deposição de silício obtidos experimentalmente nas pré-fitas *SDS*. De um modo geral, esta parte conferiu confiança suficiente nos *softwares* de análise numérica, para o seu uso no processo de projecto de um novo reactor CVD.

No âmbito do reactor *SDS* de 2ª geração, as análises da dinâmica de convecção natural interna levadas a cabo, permitiram adquirir conhecimentos básicos no que diz respeito à formação e modelação de células de convecção no interior do reactor CVD. Com o objectivo de vir a rentabilizar a deposição, observou-se a existência de uma forte correlação entre as dimensões da cavidade do reactor e a disposição das várias zonas aquecidas da amostra, na criação de células de convecção capazes de assegurar a circulação do gás junto destas. Deste estudo surgiu uma proposta de um reactor, que serviu de base ao dimensionamento de um sistema de aquecimento óptico concentrador, viável para a criação de zonas de deposição adequadas aos objectivos funcionais deste novo reactor.

O conjunto dos estudos decorridos conduziram ao delineamento de um protótipo, cuja concepção terá lugar num futuro próximo, onde será possível confirmar a validade destes, através da avaliação da uniformidade das pré-fitas produzidas pelo novo sistema de deposição CVD.

7 Bibliografia

- [1] "Crystal growth of silicon ribbons for terrestrial solar cells by the EFG method", F. Wald, in "Crystals: Growth, properties and applications" 5 149 (1981).
- [2] "The growth of silicon ribbons for photovoltaics by Edge-Supported Pulling (ESP)", T. Ciszek, in "Silicon Processing for Photovoltaics I", 131, Ed. North – Holland (1987).
- [3] "EZ-Ribbon – Method for the growth of semiconductor ribbons", A. M. Vallera, J.M. Serra, J. Maia Alves, M. C. Brito, R. M. Gamboa and J. C. Henriques.
- [4] "Silicon sheets from powder as low cost substrates for crystalline Silicon thin film solar cells", W. Zimmermann, K. Schmidt, F. Haas and A. Eyer, Proceedings of the 2th World PVSEC (1998).
- [5] R. Brendel, D. Scholten, M. Schulz, S. Oelting, H. Artmann, W. Frey, J. Krinke, H. P. Strunk and J. H. Werner, 2nd World PVSEC (1998), p.1242.
- [6] "Zone melting recrystallization of self supported silicon ribbons obtained by fast cvd from silane", C. Rodrigues Pinto, J. M. Serra, M. C. Brito, R. Gamboa, J. Maia Alves, A. M. Vallêra, Proceedings of the 21st EPVSEC, Dresden 2006.
- [7] "First solar cells on silicon ribbons obtained by fast CVD from silane", Pinto C. R., Serra J. M., Brito M. C., Silva J., Maia Alves J., Vallêra A. M, Proceedings of the 22nd EPVSEC, Milan, 2007.
- [8] "Sprayed boric acid as a dopant source for silicon ribbons", J. A. Silva, M. C. Brito, I. Costa, J. Maia Alves, J. M. Serra and A. M. Vallêra, Solar Energy Materials & Solar Cells 91 (2007) 1948-1953.
- [9] "The SDS process for silicon ribbon growth", João M. Serra*, C. Pinto, Miguel C. Brito, Jorge Maia Alves, Killian Lobato, António Vallêra, Proceedings of the Eurosun conference, Lisbon 2008.
- [10] "Monte Carlo Ray Tracing", Arvo James, Dutre Phil, -keller Alexander, et al., Siggraph Course 44, University of California (2003).
- [11] "Fundamental of Heat and Mass Transfer", Incropera, Dewitt, Bergman, Lavine, 6th edition, Willey, (2007).

- [12] “Estudo de um Processo de Preparação de Fitas de Silício para Aplicação Fotovoltaica”, J. M. Serra (1995).
- [13] “Thermal characterization of porous silicon via thermal wave interferometry”, U.Bernini, P.Maddalena, et al. Appl.Opt. 168(1999)305-314.
- [14] “Thermal Conductivity of Silicon from 300 to 1400K”, H.R.Shanks, et al., Phys.Rev.,V130N5, (1963).